

POLSKIE TOWARZYSTWO CHEMICZNE

Podstawowa terminologia stereochemii

Zalecenia 1996

Przygotowali do druku

Osman Achmatowicz i Barbara Szechner

Warszawa 1999

Tytuł oryginału:

Basic Terminology of Stereochemistry. IUPAC Recommendations 1996.

Prepared for publication by G. P. Moss

Pure Appl. Chem., **68**, 2193 - 2222 (1996).

©1996 International Union of Pure and Applied Chemistry

Organic Chemistry Division

Commission on Nomenclature of Organic Chemistry (III.1)

Commission on Physical Organic Chemistry (III.2)

Przekład z języka angielskiego

Osman Achmatowicz

©Copyright Narodowy Komitet Międzynarodowej Unii

Chemii Czystej i Stosowanej

Skład Komisji IUPAC przygotowującej dokument (1991-1994)

Połączona grupa robocza:

O. Achmatowicz, H. A. Favre, P. M. Giles Jr., M. M. Mikołajczyk, G. P. Moss (*Prowadzący*), J. C. Richer, D. Tavernier, O. Weissbach (*Sekretarz*) (z Komisji III.1);

D. H. Busch (z Komisji II.2)

P. P. I. Ahlberg, V. Gold* (*Prowadzący*), E. A. Halevi, G. Illuminati*, J. March, M. Ōki, K. Schwetlik (z Komisji III.2);

G. Allegra, P. Sigwalt (z Komisji IV.1);

J. E. Blackwood (Chemical Abstract Service);

J. Siegel (Uniwersytet Kalifornijski, San Diego).

Członkowie Komisji Nomenklatury Chemii Organicznej (III.1)

Członkowie tytularni: O. Achmatowicz (Polska) 1979-1987; H. J. T. Boss (Holandia) 1987 -, *Viceprzewodniczący* 1991 -; J. R. Bull (Republika Południowej Afryki) 1987-1993; H. A. Favre (Kanada) 1989 -, *Przewodniczący* 1991 -; P. M. Giles Jr., (USA) 1989 -; E. W. Godly (Wielka Brytania) 1987-1993, *Sekretarz* 1989-1993; D. Hellwinkel (Republika Federalna Niemiec) 1979-1987, *Viceprzewodniczący* 1981-1987; B. J. Herold (Portugalia) 1994 -; K. Hirayama (Japonia) 1975-1983; M. V. Kisakürek (Szwajcaria) 1994 -; A. D. McNaught (Wielka Brytania) 1979-1987; G. P. Moss (Wielka Brytania) 1977-1987, *Przewodniczący* 1981-1987, *Viceprzewodniczący* 1979-1981; R. Panico (Francja) 1981-1991, *Viceprzewodniczący* 1989-1991; W. H. Powell (USA) *Sekretarz* 1979-1989; J. C. Richer (Kanada) 1979-1989, *Viceprzewodniczący* 1987-1989; J. Rigaudy (Francja) 1967-1981, *Przewodniczący* 1977-1981; P. A. S. Smith (USA) 1983-1991, *Przewodniczący* 1987-1991; D. Tavernier (Belgia) 1991 -; J.G.Traynham (USA) 1991 -, *Sekretarz* 1994 -; O. Weissbach (Republika Federalna Niemiec) 1987-1991; J.L.Wiśniewski (Republika Federalna Niemiec) 1991 -.

Członkowie stowarzyszeni: O. Achmatowicz (Polska) 1987-1989; K. Bláha* (Republika Czeska) 1979-1987; H. J. T. Bos (Holandia) 1983-1987; A. J. Boulton (Wielka Brytania) 1983-1987; J. R. Bull (Republika Południowej Afryki) 1985-1987; F. Cozzi (Włochy) 1994 -; D. R. Eckroth (USA) 1975-1983; F. Fariña* (Hiszpania) 1989-1994; H. A. Favre (Kanada) 1987-1989; J. H. Fletcher (USA) 1975-1983; P. M. Giles Jr. (USA) 1983-1989; E. W. Godly (Wielka Brytania) 1979-1987; P. Grünager (Włochy) 1987-1993; H. Grűnewald (Republika Federalna Niemiec) 1989-1991; H. Gutman (Szwajcaria) 1983-1989; J. Heger (Słowacja) 1985-1989; D. Hellwinkel (Republika Federalna Niemiec) 1987-1989; K. Hirayama (Japonia) 1983-1987; R. J.-R. Hwu (USA, Towarzystwo Chemiczne Taipei) 1989 -; M. A. C. Kaplan (Brazylia) 1989 -; M. V. Kisakürek (Szwajcaria) 1987-1993; S. P. Klesney (USA) 1979-1985; A. J. Lawson (Republika Federalna Niemiec) 1991 -; W. Liebscher (Republika Federalna Niemiec) 1989 -; L. L. Loening (USA) 1979-1983; N. Lozac'h (Francja) 1977-1987; A. D. McNaught (Wielka Brytania) 1987-1989; M. Mikołajczyk (Polska) 1989 -; G. P. Moss (Wielka Brytania) 1987-1989; J. Nyitrai (Węgry) 1994 -; R. Panico (Francja) 1979-1987; H. A. Smith Jr. (USA) 1994 -; P. A. S. Smith (USA) 1979-1983; J. H. Stocker (USA) 1991 -; D. Tavernier (Belgia) 1987-1991; J. G. Traynham (USA)

* Zmarli

1989-1991; F. Vögtle (Republika Federalna Niemiec) 1972-1983; O. Weissbach (Republika Federalna Niemiec) 1979-1987.

Przewodniciele narodowi: H. Y. Aboul Enein (Arabia Saudyjska) 1988-1989; O. Achmatowicz (Polska) 1989-1991; A. T. Balaban (Rumunia) 1983-1989; R. Bicca de Alencastro (Brazylia) 1994 -; H. J. T. Bos (Holandia) 1981-1983; J. R. Bull (Republika Południowej Afryki) 1983-1985; J. R. Cannon (Australia) 1982-1987; K. C. Chan (Malezja) 1983-1987; S. Chandrasekaran (India) 1994 -; Q.-Y. Chen (Chiny) 1991 -; G. Déak* (Węgry) 1979-1992; F. Fariña* (Hiszpania) 1987-1989; M. J. Gašić (Jugosławia) 1989-1993; E. W. Godly (Wielka Brytania) 1994 -; P. Grünager (Włochy) 1984-1987; B. J. Herold (Portugalia) 1991-1993; W.-Y. Huang (Chiny) 1981-1987; S. Ikegami (Japonia) 1986 -; A. K. Ikizler (Turcja) 1987-1992; J. Kahovec (Republika Czeska) 1989 -; M. A. C. Kaplan (Brazylia) 1983-1985; P. Kristian (Słowacja) 1994 -; G. L'abbé (Belgia) 1981-1985; Eun Lee (Korea) 1994 -; X. T. Liang (Chiny) 1987-1993; L. Maat (Holandia) 1989-1991; G. Mehta (India) 1983-1985; J. Nyitrai (Węgry) 1992-1993; L. J. Porter (Nowa Zelandia) 1987 -; J. A. Retamar (Argentyna) 1980-1985; H. Schick (Republika Federalna Niemiec) 1987-1991; R. Schoenfeld* (Australia) 1980-1981; S. Swaminathan (India) 1985-1987; D. Tavernier (Belgia) 1986-1987; A. Varvoglis (Grecja) 1991-1993.

Członkowie Komisji Fizycznej Chemii Organicznej (III.2)

Członkowie tytularni: P. N. I. Ahlberg (Szwecja) 1987-1991; E. M. Arnett (USA) 1985-1987; J. F. Bunnett (USA) 1973-1983, *Przewodniczący* 1978-1983; M. P. Doyle (USA) *Sekretarz* 1987-1991; W. Drenth (Holandia) *Sekretarz* 1991 -; V. Gold (Wielka Brytania), *Przewodniczący*, 1983-1985; E. A. Halevi (Izrael) 1987-1989; G. Illuminati (Włochy) 1977-1985; W. P. Jencks (USA) 1981-1985; R. A. Y. Jones (Wielka Brytania) 1981-1991, *Sekretarz* 1987-1991; J. M. McBride (USA) 1987-1993; V. I. Minkin (Rosja) 1991 -; P. Müller (Szwajcaria) 1985-1993, *Przewodniczący*, 1987-1993; O. M. Nefedov (Rosja) 1981-1991; M. Ōki (Japonia) 1987-1991; C. L. Perrin (USA) 1994 -; Z. Rappoport (Izrael) 1991 -; K. Schwetlik (Republika Federalna Niemiec) 1977-1985; J. Shorter (Wielka Brytania) 1989 -; Y. Takeuchi (Japonia) 1991 -; T. T. Tidwell (Kanada) *Przewodniczący*, 1994 -.

Członkowie stowarzyszeni: P. N. I. Ahlberg (Szwecja) 1991 -; T. A. Albright (USA) 1987-1991; E. Baciocchi (Włochy) 1994 -; J. F. Bunnett (USA) 1983-1985; M. P. Doyle (USA) 1979-1987; W. Drenth (Holandia) 1987-1991; V. Gold (Wielka Brytania) 1977-1981; A. J. Kirby (Wielka Brytania) 1994 -; J. S. Littler (Wielka Brytania) 1977-1987; A. Maltsev (Rosja) 1985-1987; J. March (USA) 1977-1987; V. I. Minkin (Rosja) 1987-1991; P. Müller (Szwajcaria) 1981-1985; O. M. Nefedov (Rosja) 1991-1993; J. R. Penton (Szwajcaria) 1981-1985; C. L. Perrin (USA) 1991-1993; D. J. Raber (USA) 1991 -; M.-F. Ruasse (Francja) 1994 -; K. Schwetlik (Republika Federalna Niemiec) 1987-1989; H.-U. Siehl (Republika Federalna Niemiec) 1994 -; Y. Takeuchi (Japonia) 1987-1991; J. Toullec (Francja) 1981-1985; P. Van Brandt (Belgia) 1987-1993; J. R. Zdysiewicz (Australia) 1989 -.

Przedstawiciele narodowi: J.-L. Abboud Mas (Hiszpania) 1991-1993; P. N. I. Ahlberg (Szwecja) 1980-1987; E. Baciocchi (Włochy) 1989-1993; A. T. Balaban (Rumunia) 1981-1986; M. V. Bhatt (India) 1989-1991; J. A. Cavaleiro (Portugalia) 1991 -; J. Chandrasekhar (India) 1994 -; W. Drenth (Holandia) 1984-1987; J. J. E. Humeres Allende (Brazylia) 1983-1987, 1991-1993; G. Ji (Chiny)

* Zmarli

1994 -; X. Jiang (Chiny) 1987-1993; P. Laszlo (Belgia) 1987-1991; D. J. McLennan (Nowa Zelandia) 1982-1991; M. Lj. Mihailović (Jugosławia) 1979-1986; M. Nógrádi (Węgry) 1985-1987; Z. Rappoport (Izrael) 1987-1991; R. Sabbath (Francja) 1989-1993; J. A. Silva Cavaleiro (Portugalia) 1991-1993; B. E. Smart (USA) 1987-1991; J. Suh (Korea) 1989-1993; O. Tarhan (Turcja) 1988-1991; T. T. Tidwell (Kanada) 1991-1993; M. Tiúler (Słowenia) 1987-1993; J. Vaughan (Nowa Zelandia) 1980-1982; J. Závada (Republika Czeska) 1987-1989; J. Zdysiewicz (Australia) 1987-1989.

Podstawowa terminologia stereochemii (Zalecenia IUPAC 1996)

Streszczenie: Jest to glosariusz ważniejszych i najczęściej używanych terminów stereochemicznych. Wykracza on poza listę terminów zdefiniowanych w *Nomenklaturze Związków Organicznych* [1], [2] i zawiera także pewne terminy występujące w *Glosariuszu Terminów Stosowanych w Fizycznej Chemii Organicznej* [3]. Dodano również pewne terminy z chemii nieorganicznej i makromolekularnej. Włączono również niektóre błędnie stosowane terminy wraz ze wskazówkami dotyczącymi właściwego ich stosowania lub akceptowalnych alternatyw.

W obecnych *Zaleceniach* występuje wiele symboli stosowanych w nomenklaturze stereochemicznej, ale szczegóły ich zastosowania lub włączania do nazw związków chemicznych pozostawiono do odpowiednich zaleceń. Pominięto terminologię odnoszącą się do technik stosowanych w ustalaniu stereochemii, a także terminy używane w opisie mechanizmów reakcji.

Wstęp

W czasie, gdy IUPAC-owska Komisja Nomenklatury Chemii Organicznej przygotowywała *Część E: Stereochemia (Zalecenia 1974)* [1] jej celem było uzupełnienie ogólnej nomenklatury związków organicznych [2] opisem sposobów wskazywania stereochemii. Ponieważ w tym czasie nie było żadnych IUPAC-owskich zaleceń na temat terminologii stereochemicznej, *Część E* zawierała tylko podstawowe elementy słownictwa stereochemicznego. W roku 1983 Komisja Fizycznej Chemii Organicznej IUPAC opublikowała *Glosariusz terminów stosowanych w fizycznej chemii organicznej* [3], w którym, ze względu na istnienie *Części E*, nie uwzględniono terminów stereochemicznych. Wkrótce jednak okazało się, że odrębny glosariusz terminów stereochemicznych ułatwiłby pracę obydwu komisjom i w związku z tym utworzono wspólną grupę roboczą, do której zaproszono również przedstawicieli Komisji Nomenklatury Chemii Nieorganicznej i Komisji Nomenklatury Makromolekularnej.







Ta grupa robocza, po rozważeniu bardzo długiej listy terminów, które mogłyby zostać uwzględnione, zdecydowała, że skoncentruje się na terminach podstawowych dla wszystkich Komisji oraz na takich, które są bardzo szeroko stosowane bądź stosowane błędnie. W tym ostatnim przypadku zdecydowano, że nie wystarczy wskazać błędność terminu, ale należy podać sposób prawidłowego

postępowania lub akceptowalną alternatywę. Przygotowanie bardziej wyczerpującego *Glosariusza Terminów Stereochemicznych* pozostawiono do ewentualnego drugiego wydania lub, być może, połączonego słownika terminów stereochemicznych i innych terminów fizycznej chemii organicznej.

W tekście występuje wiele symboli stosowanych w nomenklaturze stereochemicznej, ale nie jest intencją tych zaleceń przedstawianie szczegółów ich zastosowania ani włączania do nazw związków. Zainteresowani czytelnicy znajdą w tekście odnośniki do oryginalnych publikacji. Pewne szczegóły znajdują się w zaleceniach IUPAC-u dotyczących nomenklatury związków organicznych [2],[3], nieorganicznych [4], chemii makromolekularnej [5] i biochemicznej [6].

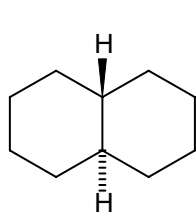
Pominięto terminologię odnoszącą się do technik stosowanych w określaniu stereochemii [7]. Niektóre terminy stereochemiczne stosowane w opisie mechanizmów reakcji znajdują się w *Glosariuszu Terminów Stosowanych w Fizycznej Chemii Organicznej* [3].

Graficzne przedstawianie trójwymiarowych struktur [8]

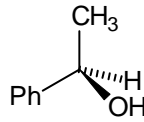
Diagramy strukturalne przedstawiające stereochemię należy rysować bardzo starannie, aby wykluczyć możliwość niejednoznaczności. Ogólnie, zwykłe kreski reprezentują wiązania leżące w przybliżeniu w płaszczyźnie rysunku; wiązanie z atomem leżącym nad płaszczyzną przedstawia wytłuszczony klin  (wąski koniec przedstawia atom w płaszczyźnie rysunku), lub, alternatywnie, wytłuszczona linia ; wiązania pod płaszczyzną reprezentują krótkie równoległe kreseczki . Zamiast nich rysuje się czasami linię przerywaną , ale lepiej, aby była ona zarezerwowana dla wiązań cząstkowych, delokalizacji lub wiązań wodorowych. Nie zaleca się używania klina z równoległych kresczek , ponieważ jest to niejednoznaczne i powszechnie stosowane na dwa, przeciwne sobie, sposoby. Jedni uważają, że węższy koniec jest w płaszczyźnie rysunku, inni - że dalej od patrzącego. Jeżeli stereochemia nie jest znana, wskazują się to falistą linią . Zdecydowanie odradza się używanie kropek lub kółek dla wskazania centrum stereochemii. Inne specyficzne konwencje wspomniane w obecnych *Zaleceniach* to projekcje Fischera, projekcje Newmana, rzuty konikowe i klinowe.

Nie można określić ścisłych reguł rysowania wzorów stereochemicznych. Ogólnie, najlepiej jest, jeśli wszystkie pierścienie układu *orto*-skondensowanych

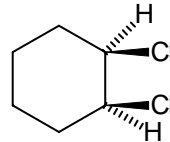
pierścieni (lub nasyconych pochodnych) rysuje się w płaszczyźnie rysunku, a podstawniki mostkowe nad lub pod płaszczyzną (1). W strukturach acyklicznych (2) lub w przypadku innych podstawników pierścieni (3) [włączając mostki (4)] wiązania rysuje się jako skierowane nad lub pod płaszczyznę. Nie należy pomijać atomów wodoru w pozycjach o określonej stereochemii.



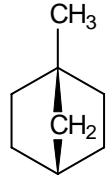
1



2

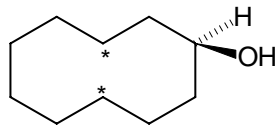


3

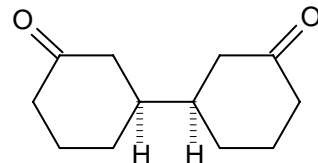


4

Podstawników, których ułożenie przestrzenne chcemy wskazać, nie należy umieszczać na rysunku przy atomach węgla znajdujących się w wierzchołkach kątów wklęsłych (zaznaczonych gwiazdkami we wzorze 5, chociaż pozycje te nadają się do umieszczania grup karbonylowych bądź *N*-metylowych). Wiązanie pomiędzy dwoma pozycjami z zadaną stereochemią rysuje się zwykłą kreską (6).

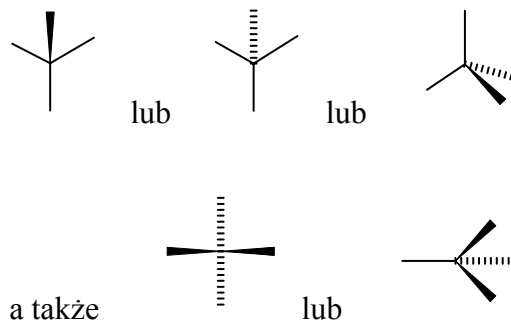


5



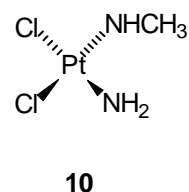
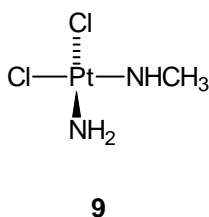
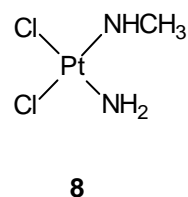
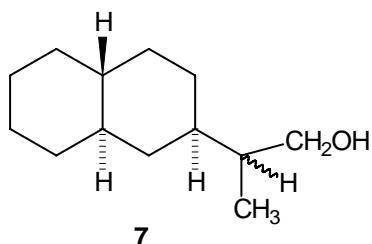
6

Dla stereochemii tetraedrycznej zaleca się rysunki:

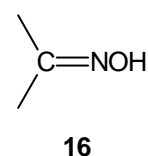
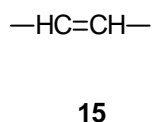
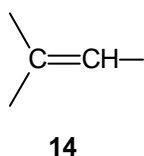
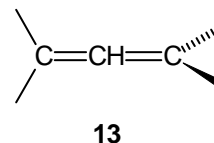
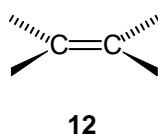
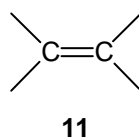


Linie falistą stosuje się do wskazania, że stereochemia jest nieznaną (7) ale występuje tylko jeden izomer, lub, po wyjaśnieniu w tekście, że występują oba stereoizomery, które mogą być w razie potrzeby zdefiniowane. Jeżeli nie chce się wskazywać stereochemii, najlepiej rysować zwykłe kreski.

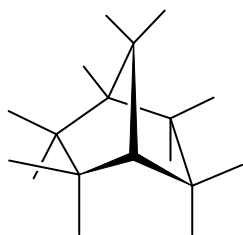
Płaskie kwadratowe struktury (**8**) można również przedstawiać wzorami (**9**) lub (**10**).



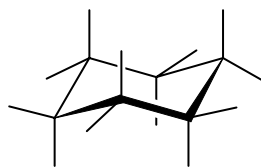
Wiązania podwójne, których stereochemię chcemy wskazać (**11**, **12**, **13**), należy rysować z możliwie dokładnymi kątami (ok. 120°). Brak informacji stereochemicznych reprezentuje rysunek liniowy (**14**, **15** i **16**).



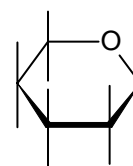
W rysunkach perspektywicznych zaleca się wskazywanie, wytłuszczonymi kreskami lub klinami, krawędzi pierścienia, które przyjmuje się za leżące z przodu (**17**, **18** i **19**) i „przerywanie” wiązań z tyłu, jeżeli przecina je wiązanie bliżej patrzącego (**17** i **18**). W takich rysunkach stereochemicznych wiązania z podstawnikami rysuje się zazwyczaj zwykłymi kreskami.



17



18



19

Glosariusz

Kursywa oznacza terminy występujące w tym glosariuszu (lub symbole, które zwykle pisze się kursywą).

Po terminach polskich w nawiasie podane są pisane kursywą ich odpowiedniki angielskie.

ac (*ac*)

Patrz *kąt torsyjny*.

Achiralny (*Achiral*)

Patrz *chiralność*.

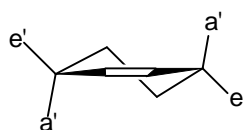
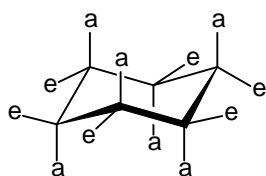
Achirotopowy (*Achirotopic*)

Patrz *chirotopowy*.

Aksjalny, ekwatorialny (*Axial, Equatorial*)

W formie krzesłowej cykloheksanu wiązania z atomami pierścienia (i indywidualna molekularne przyłączone tymi wiązaniami) są nazywane aksjalnymi lub ekwatorialnymi w zależności od tego, czy tworzą względnie duży czy mały kąt z płaszczyzną zawierającą lub przechodzącą najbliższej większości atomów pierścienia. Tak więc wiązania aksjalne są w przybliżeniu równoległe do osi C_3 , a

wiązania ekwatorialne są w przybliżeniu równoległe do dwóch wiązań pierścienia. Takie nazwy są również stosowane dla krzesłowych form innych nasyconych pierścieni sześciocząłowych. Analogiczne wiązania występujące w pozycjach allilowych mono-nienasyconych pierścieni sześciocząłowych nazywane są pseudoaksjalnymi (lub quasi-aksjalnymi) i pseudoekwatorialnymi (lub quasi-ekwatorialnymi). Terminy aksjalny i ekwatorialny były w podobnym znaczeniu używane w stosunku do połałdowanej konformacji cyklobutanu, koronowego konformera cyklooktenu itd., a terminy pseudoaksjalny i pseudoekwatorialny w związku z niepłaskimi strukturami cyklopentanu i cykloheksanu (alternatywne użycie terminów aksjalny i ekwatorialny w strukturze bipiramidalnej - patrz *Apikalny, bazowy, ekwatorialny*).

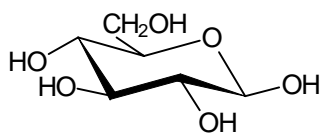


a = aksjalny
e = ekwatorialny
a' = pseudoaksjalny
e' = pseudoekwatorialny

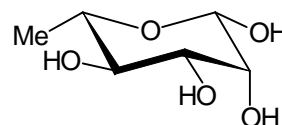
α (alfa), β (beta) (α /alpha), β /beta/)

Stereodeskryptory używane w różnym znaczeniu.

1. Względne stereodeskryptory stosowane w nomenklaturze węglowodanów dla określenia konfiguracji anomerycznego atomu przez porównanie jej z konfiguracją atomu odniesienia dla centrum anomerycznego. W prostych przypadkach atom odniesienia dla centrum anomerycznego jest tym samym co konfiguracyjny atom odniesienia. I tak w α -D-glukopiranozie atomem odniesienia jest C-5, a grupy OH przy C-1 i C-5 w projekcji Fischera są po tej samej stronie [9].



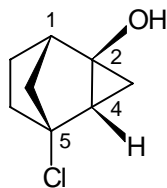
β -D-glukoza



β -L-ramnoza

2. Względne stereodeskryptory stosowane w *Chemical Abstracts* do określenia konfiguracji cyklicznej molekuly (również układów policyklicznych) z kilkoma centrami stereogenicznymi, gdzie stroną α płaszczyzny odniesienia jest ta, po której przy centrum stereogenicznym o najniższym lokancie

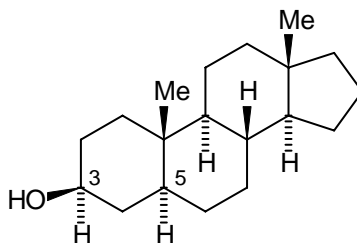
znajduje się podstawnik mający pierwszeństwo zgodnie z regułami CIP. Druga strona jest β .



tricyklo[3.2.1.0^{2,4}]oktan-2-ol, 5-chloro, (1 α ,2 α ,4 α ,5 β)-

3. Absolutne stereodeskryptory pierwotnie pomyślane dla nomenklatury stereoidów. Jednakże mają one sens tylko wtedy jeżeli konfiguracja absolutna i sposób zorientowania struktury są takie, że definiują płaszczyznę i sposób ułożenia względem niej molekule. Podstawniki ponad płaszczyznę steroidu są opisywane jako β i pokazywane pogrubioną kreską (\blacktriangleright lub \blacksquare), znajdujące się pod płaszczyzną są oznaczane jako α i pokazywane linią przerywaną ("....." lub "----"). Metodę tę rozszerzono na tetrapirole i inne klasy związków.

Patrz [10], [11].



5 α -androstan-3 β -ol

Ambo (*Ambo*)

Przedrostek stosowany do wskazania, że molekule zawierająca dwa (lub więcej) elementów chiralnych występuje jako mieszanina dwóch (lub więcej) diastereoizomerów w nieokreślonej proporcji. Na przykład, dipeptyd utworzony z L-alaniny i DL-leucyny nazywa się L-alanylo-*ambo*-leucyna.

Patrz [12], [13].

Analiza konformacyjna (*Conformational Analysis*)

Oszacowanie względnych energii (lub stabilności termodynamicznych), reaktywności i właściwości fizycznych alternatywnych *konformacji* indywidualnego molekularnego, zwykle przez zastosowanie jakościowych lub ilościowych reguł albo semiempirycznych obliczeń.

Anizometryczny (*Anisometric*)

Patrz *izometryczny*.

Anomery (*Anomers*)

Diastereoizomery glikozydów, hemiacetali i podobnych cyklicznych form cukrów lub zbliżonych molekuł, różniące się *konfiguracją* tylko na C-1 w aldozie, C-2 w ketozie itd.

Anti (*Anti*)

1. Patrz *kąt torsyjny*.
2. Patrz *endo, egzo, anti*.
3. Patrz także [3], gdzie termin *anti* jest stosowany do opisu reakcji antarafacjalnej addycji lub eliminacji.
4. Poprzednio używany do opisu stereochemii oksymów i podobnych układów (patrz *E, Z*).

Antyklinalny (*Anticlinal*)

Patrz *kąt torsyjny*.

Antyperiplanarny (*Antiperiplanar*)

Patrz *kąt torsyjny*.

Antypody (*Antipodes*)

Przestarzały synonim *enancjomerów*. Używanie zdecydowanie niewskazane.

Antypody optyczne (*Optical Antipodes*)

Dawniej synonim *enancjomerów*.

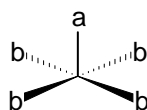
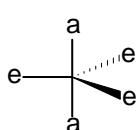
Używanie zdecydowanie niewskazane.

ap

Patrz *kąt torsyjny*.

Apikalny, bazowy, ekwatorialny (*Apical, Basal, Equatorial*)

W strukturze bipyramidy trygonalnej (np. pięciokoordynacyjna bipyramida trygonalna z fosforem jako atomem centralnym) termin apikalny odnosi się do dwóch położzeń kolinearnych z centralnym atomem lub do wiązań łączących tak położone atomy z atomem centralnym. Trzy równocenne wiązania (lub pozycje) leżące na płaszczyźnie przechodzącej przez centralny atom i prostopadłej do kierunku wiązań apikalnych określa się jako ekwatorialne (inne znaczenie terminu patrz *aksjalny, ekwatorialny*). Terminem apikalne określa się również wiązanie skierowane do atomu znajdującego się w środku (lub blisko niego) podstawy do wierzchołka struktury piramidalnej. Położenie na podstawie (lub blisko niej) piramidy lub wiązania łączące atomy w tych położeniach z atomem centralnym są nazywane bazowymi. Wiązania apikalne nazywane były także aksjalnymi.



a = apikalne
b = bazowe
e = ekwatorialne

Asymetryczny (*Asymmetric*)

Pozbawiony wszystkich *elementów symetrii* (poza trywialną jednokrotną osią symetrii) to znaczy należący do grupy punktowej symetrii C_1 . Termin był używany nieściśle (i niepoprawnie) do opisu nieobecności w molekułe osi przemiennych czyli dla wskazania chiralności, i to znaczenie przetrwało w tradycyjnych terminach: *asymetryczny atom węgla, asymetryczna synteza, asymetryczna indukcja* itp.

Asymetryczny atom węgla (*Asymmetric Carbon Atom*)

Tradycyjna nazwa (van't Hoff) atomu węgla związanego z czterema różnymi podstawnikami (atomami lub grupami) np. Cabcd. Patrz także *centrum chiralności*.

Atropoizomery (*Atropisomers*)

Grupa *konformerów*, które mogą być wydzielone jako odrębne *rodzaje chemiczne*, a które powstają w następstwie ograniczonego obrotu wokół pojedynczego wiązania (patrz *bariera rotacji*), np. *orto*-podstawione bifenyle, 1,1,2,2-tetra-*tert*-butyloetan.

Bariera rotacji (*Rotational Barrier*)

Przy rotacji wokół wiązania, bariera energii potencjalnej między dwoma sąsiadującymi minimami energii indywidualnego molekularnego, jako funkcja *kąta torsyjnego*.

Bazowy (*Basal*)

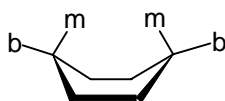
Patrz *apikalny*, *bazowy*, *ekwatorialny*.

β (beta) (*β /beta/*)

Patrz α , β .

Bukszprytowy, masztowy (*Bowsprit, Flagpole*)

W formie łodziowej cykloheksanu i pokrewnych struktur występują dwa atomy pierścienia leżące poza płaszczyzną wyznaczoną przez cztery pozostałe. Egzocykliczne wiązania tych dwóch atomów skierowane w przybliżeniu równoległe do tej płaszczyzny nazywane są bukszprytowymi; dwa pozostałe wiązania - masztowymi.



b - bukszprytowy
m - masztowy

Centrum asymetrii (*Asymmetric Centre*)

Patrz *centrum chiralności*.

Centrum chiralności (*Chirality Centre, Centre of Chirality*)

Atom związany z zespołem ligandów rozmieszczonych w przestrzeni tak, że nie nakładają się ze swoim odbiciem lustrzanym. Centrum chiralności jest więc rozszerzeniem pojęcia *asymetrycznego atomu węgla* na atomy centralne będące dowolnymi pierwiastkami, np. N^+abcd , $Pabc$ i oczywiście $Cabcd$.

Centrum prochiralności (*Prochirality Centre*)

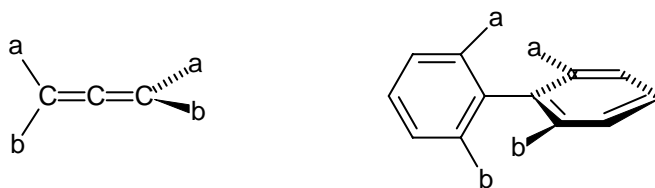
Centrum prochiralności nazywa się atom molekuly, który staje się *centrum chiralności* w wyniku wymiany jednego z dwóch związanych z nim stereoheterotopowych ligandów na inny ligand, np. C-1 w etanolu, C-3 w butan-2-olu.

Chiralność (*Chirality*)

Geometryczna właściwość sztywnego obiektu (bądź rozmieszczenia w przestrzeni punktów lub atomów) polegająca na *nienakładalności* ze swoim odbiciem lustrzanym. Taki obiekt nie ma elementów symetrii drugiego rodzaju (płaszczyzny lustrzanej, $\sigma = S_1$, środka symetrii, $i = S_2$, osi przemiennej, S_{2n}). Jeśli obiekt nakłada się ze swoim odbiciem lustrzanym to jest on achiralny. Patrz także *ręczność*.

Chiralność osiowa (*Axial Chirality*)

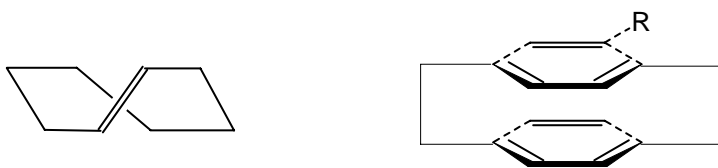
Termin określający stereoizomery powstające w następstwie nie płaskiego rozmieszczenia czterech grup w parach wokół *osi chiralności*. Przykładami są alleny $abC=C=Ccd$ (lub $abC=C=Cab$) i atropoizomeria *orto*-podstawionych bifenyli. *Konfigurację* indywidualów molekularnych, w których występuje chiralność osiowa wskazuje się stereodeskryptorami R_a i S_a (albo P lub M).



Chiralność płaszczyznowa (*Planar Chirality*)

Termin używany przez niektórych specjalistów w odniesieniu do stereoizomerii wynikającej z ułożenia grup(y) poza płaszczyzną, zwaną *płaszczyzną chiralności*. Przykładami chiralności płaszczyznowej są *atropoizomeria (E)*-cyklooktenu (płaszczyzna chiralności = podwójne wiązanie i związane z nim atomy) lub monopodstawiony paracyklofan (płaszczyzna chiralności = podstawiony pierścień). Konfigurację indywidualu molekularnego mającego chiralność

płaszczyznową określa się za pomocą stereodeskryptorów R_p i S_p (albo P i M).



Chiralny (*Chiral*)

Mający właściwość *chiralności*.

W odniesieniu do molekuł termin był używany w różnym sensie przez różnych badaczy. Niektórzy odnoszą go wyłącznie do całej cząsteczki, podczas gdy inni stosują go do części molekuly. Np. w myśl tego ostatniego poglądu związki mezo można traktować jako złożone z dwóch chiralnych części o przeciwnym sensie chiralności. Takie stosowanie terminu powinno być zaniechane. Patrz *enancjomorf*.

W zastosowaniu do zbioru molekuł niektórzy ograniczają termin do tych zbiorów, w których wszystkie molekuly mają ten sam *sens chiralności*, co lepiej określać *enancjomerycznie czysty*. Inni rozszerzają termin na *racemiczne* zbiory, które lepiej nazywać *racematami*. Powinno się unikać używania terminu *chiralny* do opisu zbioru molekuł.

Chiroptyczny (*Chiroptic/Chiroptical*)

Termin odnoszący się do technik optycznych (stosujących refrakcję, absorpcję lub emisję promieniowania anizotropowego) do badania chiralnych substancji [np. pomiar skręcalności optycznej przy ustalonej długości fali, dyspersja skręcalności optycznej (ORD), dichroizm kołowy (CD) i polaryzacja kołowa luminescencji (CPL)].

Chirotopowy (*Chirotopic*)

Określenie atomu (lub punktu, grupy, strony itd. w modelu molekuly) który znajduje się w *chiralnym* otoczeniu. To co znajduje się w achiralnym otoczeniu nazywane jest *achirotopowym*.

cis, trans (*cis, trans*)

Deskryptory, które wskazują wzajemną relację pomiędzy dwoma ligandami przyłączonymi do różnych atomów związanych podwójnym wiązaniem albo zawartych w pierścieniu. O dwóch ligandach mówimy, że są ułożone *cis* w stosunku do siebie jeśli znajdują się po jednej stronie płaszczyzny. Jeśli są po przeciwnych stronach, ich wzajemna relacja określana jest jako *trans*. W przypadku podwójnego wiązania płaszczyzna odniesienia jest prostopadła do odpowiednich wiązań σ i przechodzi przez podwójne wiązanie. Dla pierścienia (pierścień może być w konformacji rzeczywistej lub założonej, ale bez kątów wklęsłych przy dwóch podstawionych atomach) jest to uśredniona płaszczyzna pierścienia (pierścieni). Dla alkenów określenia *cis* i *trans* mogą być dwuznaczne i dlatego w nomenklaturze związków organicznych zostały zastąpione przez konwencję *E,Z*. Jeżeli z pierścieniem związane są więcej niż dwa podstawniki, użycie deskryptorów *cis* i *trans* wymaga zdefiniowania podstawnika odniesienia.

Patrz [1], reguły E-2.3.3., E-2.3.4 i [2b], reguła R-7.1.1

Czynność optyczna (*Optical Activity*)

Próbkę materii zdolną do skręcenia płaszczyzny przepuszczonej przez nią wiązki światła spolaryzowanego w płaszczyźnie określa się jako optycznie czynną (lub mającą czynność optyczną). Skręcalność optyczna jest klasyczną wyróżniającą właściwością układu (wystarczającą ale niekonieczną) zawierającego nierówne ilości odpowiednich *enancjomerów*. Enancjomer skręcający płaszczyznę światła w kierunku zgodnym z ruchem wskazówek zegara (patrzac z kierunku przeciwnego do rozchodzenia się wiązki światła) w określonych warunkach pomiaru nazywa się prawoskrętnym i jego nazwę chemiczną lub wzór poprzedza przedrostek (+)-; enancjomer skręcający płaszczyznę światła w przeciwnym kierunku jest lewoskrętny i oznacza się go przedrostkiem (-). Materiały optycznie czynne wywołują również inne zjawiska *chirooptyczne*.

Czystość enancjomeryczna (*Enantiomeric purity*)

Patrz *nadmiar enancjomeru*.

Czystość optyczna (*Optical Purity*)

Stosunek wartości zmierzonej skręcalności optycznej próbki stanowiącej mieszaninę enancjomerów do wartości skręcalności optycznej jednego czystego enancjomeru. Patrz *nadmiar enancjomeryczny*.

D, L, DL (*D, L, DL*)

Patrz *konwencja Fischera-Rosanoffa*

d, l, dl (*d, l, dl*)

Użycie zdecydowanie niewskazane.

Zarzucone alternatywy dla prefiksów, odpowiednio, (+) i (-) [stosowanych do wskazania znaku skręcalności optycznej enancjomerów mierzonej w określonych warunkach (a zatem służących do rozróżniania enancjomerów)] i (±) dla racematu.

Δ (delta), Λ (lambda) [*Δ (delta), Λ (lambda)*]

Oznaczenie stereoisomerów tris(didentnych) kompleksów metali i innych oktahedralnych kompleksów. Patrz *helisowość*, patrz także [4b], reguły I-10.7.2.1 i I-10.7.2.3.

Deracemizacja (*Deracemisation*)

Patrz *asymetryczna transformacja*.

Desymetryzacja (*Desymmetrization*)

Przekształcenie obiektu, w którym następuje utrata jednego lub więcej elementów symetrii takich jak te, które wykluczają *chiralność* (płaszczyzna lustrzana, środek symetrii, osie przemienne), tak jak to ma miejsce w przemianie *prochiralnego* indywiduum molekularnego w chiralne.

Diastereoizomeria (*Diastereoisomerism*)

Stereoizomeria inna niż *enancjomeria*. Diastereoizomery (albo diastereomery) są izomerami nie będącymi w relacji jak obraz do swego odbicia lustrzanego. Diastereoizomery charakteryzują się różnicami we właściwościach fizycznych i różnicami w chemicznym oddziaływaniu zarówno z achiralnymi jak i chiralnymi reagentami.

Diastereoizomery (diastereomery) [*Diastereoisomers (Distereomers)*]

Patrz *diastereoizomeria*.

Diastereoizomeryzacja (*Diastereoisomerisation*)

Interkonwersja *diastereoizomerów*.

Diastereomery (*Diastereomers*)

Patrz *diastereoizomeria*.

Diastereomorfizm (*Diastereomorphism*)

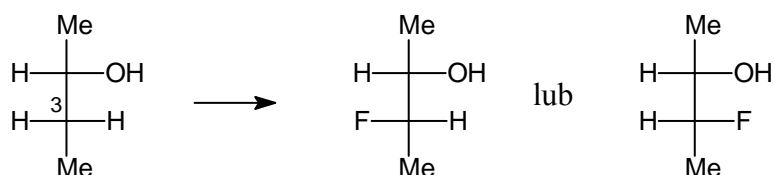
Relacja pomiędzy obiektami (lub modelami) analogiczna do relacji pomiędzy *diastereoizomerycznymi* indywiduami molekularnymi.

Diastereoselektywność (*Diastereoselectivity*)

Patrz *stereoselektywność*.

Diastereotopowy (*Diastereotopic*)

Konstytucyjnie równocenne atomy lub grupy w molekuale, pomiędzy którymi nie zachodzi relacja symetrii. Zamiana jednego z dwóch diastereotopowych atomów lub grup prowadzi do powstania jednego z pary *diastereoizomerów*. W poniższym przykładzie dwa atomy wodoru grupy metylenowej C-3 są diastereotopowe. Patrz także: *prochiralność*, *enantjotopowy*, *heterotopowy*.

● **Distomer** (*Distomer*)

Jeden z enancjomerów biologicznie czynnego związku nie wykazujący lub wykazujący w nieznacznym stopniu określony efekt biologiczny. Patrz *eutomer*.

Dyssymetria (*Dissymmetry*)

Przestarzały synonim terminu *chiralność*.

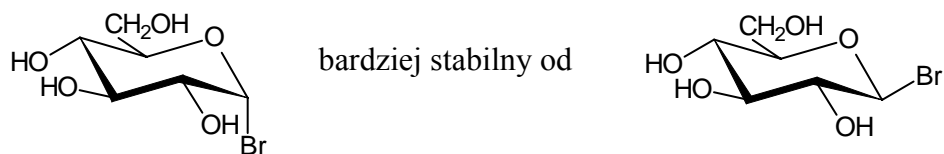
E,Z (*E,Z*)

Przyjęte *stereodeskrytory* stereoizomerycznych alkenów $R^1R^2C=CR^3R^4$ ($R^1 \neq R^2$, $R^3 \neq R^4$, ale ani R^1 ani R^2 nie muszą być różne od R^3 czy R^4), kumulenów ($R^1R^2C=[C=C]_n=CR^3R^4$) i zbliżonych układów np. $R^1R^2C=NOH$,

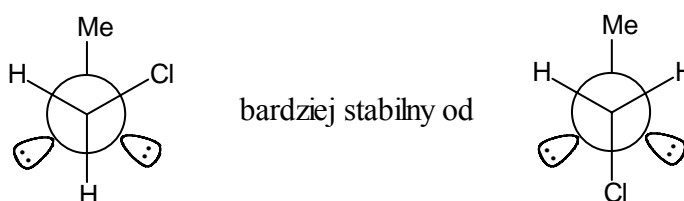
$\text{HON}=\text{C}\{[\text{CH}_2]_n\}_2\text{C}=\text{NOH}$. Grupę o najwyższym *pierwszeństwie CIP* związaną z jednym z końcowych atomów podwójnego wiązania alkenu, oksymu itd. lub kumulenu (tzn. R^1 lub R^2) porównuje się z grupą o najwyższym pierwszeństwie przyłączoną do drugiego końcowego atomu z wiązaniem podwójnym (tzn. R^3 lub R^4). Stereoizomer określa się jako *Z* (*zusammen* = razem) jeśli grupy leżą po tej samej stronie płaszczyzny odniesienia, przechodzącej przez podwójne wiązanie i prostopadłej do płaszczyzny, na której leżą wiązania łączące grupy z atomami podwójnego wiązania; drugi ze stereoizomerów określany jest jako *E* (*entgegen* = przeciwny). Deskryptory mogą być stosowane w odniesieniu do struktur z ułankowym (pomiędzy jeden i dwa) rzędem wiązania i do podwójnych wiązań zawierających atomy pierwiastków innych niż węgiel. Nie należy ich stosować do określania wzajemnej relacji podstawników w pierścieniu. Patrz także *cis-trans*.

Efekt anomeryczny (*Anomeric Effect*)

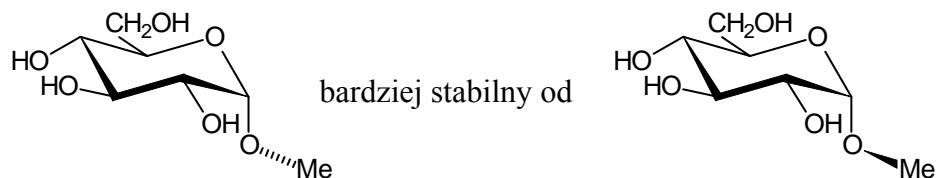
Pierwotnie, (w chemii węglowodanów) termodynamiczna preferencja do zajmowania położenia aksjalnego przez polarne grupy związane z C-1 (anomeryczny atom węgla w pochodnych glikopiranozyłowych).



Obecnie ten efekt jest traktowany jako szczególny przypadek ogólnego zjawiska (uogólniony efekt anomeryczny) uprzywilejowania konformacji *synklinalnej* (*gauche*) wokół wiązania C-Y w układzie X-C-Y-C, gdzie X i Y są heteroatomami mającymi niewiążące pary elektronów; zwykle przynajmniej jeden z nich jest atomem azotu, tlenu lub fluorowca. Na przykład w chloro(metoksy)metanie efekt anomeryczny stabilizuje konformację synklinalną.



W glikopiranozydach alkili efekt anomeryczny odnosi się do dwóch sytuacji (i) towarzyszy endocyklicznemu wiązaniu C-1 - atom tlenu (efekt endoanomeryczny) i (ii) egzocyklicznemu wiązaniu C-1 - atom tlenu (efekt egzoanomeryczny).



W pewnych układach np. solach glikopiranozylotrialkiloamoniowych stwierdzono przeciwną preferencję, którą określa się jako odwrotny efekt anomeryczny.

Efekt gauche (*Gauche Effect*)

1. Stabilizacja konformacji *gauche* (synklinalnej) we fragmencie dwuwęglowym związanym wicynalnie z atomami elektroujemnych pierwiastków, np. 1,2-difluoroetan.
2. Destabilizacja konformacji *gauche* (synklinalnej) we fragmencie dwuwęglowym związanym wicynalnie z dużymi, miękkimi i polaryzowalnymi atomami pierwiastków, takich jak atomy siarki i bromu.

Ekwatorialny (*Equatorial*)

1. Stosowanie tego terminu w odniesieniu do cykloheksanu patrz *aksjalny*, *ekwatorialny*
2. Stosowanie tego terminu w odniesieniu do struktury bipiramidy patrz: *apikalny*, *bazowy*, *ekwatorialny*.

Element chiralności (*Chirality Element, Element of Chirality*)

Ogólna nazwa dla *osi chiralności*, *centrum chiralności* i *plaszczyny chiralności*.

Enancjokonwergencja (*Enantioconvengence*)

Patrz *stereokonwergencja*.

Enancjomer (*Enantiomer*)

Jeden z pary indywidualów molekularnych, które są swoimi odbiciami lustrzanymi i są nie nakładające się.

Patrz także *enancjomorf*.

Enancjomerycznie czysty (*Enantiomerically Pure/ Enantiopure*)

Próbka, w której wszystkie molekuly mają (w granicach wykrywalności) ten sam sens chiralności. Stosowanie terminu homochiralny jako synonimu jest zdecydowanie niezalecane. Patrz *homochiralny*.

Enancjomerycznie wzbogacony (*Enantiomerically Enriched/ Enantioenriched*)

Próbka chiralnej substancji, dla której stosunek enancjomerów jest większy niż 50:50, ale mniejszy niż 100:0.

Enancjomeryzacja (*Enantiomerisation*)

Interkonwersja *enancjomerów*. Patrz *racemizacja*.

Enancjomorf (*Enantiomorph*)

Jeden z pary *chiralnych* obiektów, które są nie nakładającymi się odbiciami lustrzanymi. Przymiotnik enancjomorficzny jest również stosowany w odniesieniu do grup będących swoimi odbiciami lustrzanymi w indywidualum molekularnym.

Enancjoselektywność (*Enantioselectivity*)

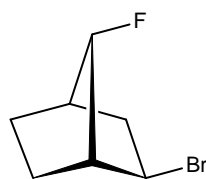
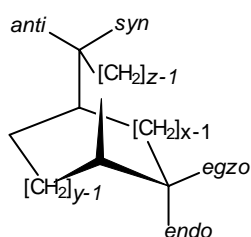
Patrz *stereoselektywność*.

Enancjotopowy (*Enantiotopic*)

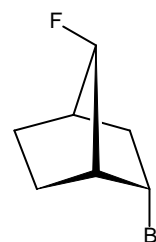
Konstytucyjnie identyczne atomy lub grupy w molekuale, które są związane elementami symetrii tylko drugiego rodzaju (płaszczyzna symetrii, środek inwersji lub osie przemienne). Np. dwie grupy c w ugrupowaniu Cabcc są enancjotopowe. Zamiana jednej z grup enancjotopowych na inną, np. d prowadzi do jednego z enancjomerów. Analogicznie, jeśli kompleksowanie lub addycja do jednej z dwóch stron wyznaczonych przez podwójne wiązanie lub inną płaszczyznę molekularną prowadzi do chiralnego rodzaju, to takie dwie strony nazywamy enancjotopowymi. Patrz także *prochiralny*, *diastereotopowy*.

endo, *egzo*, *syn*, *anti* (*endo*, *exo*, *syn*, *anti*)

Deskrytory względnej konfiguracji grup związanych z nie przyczołkowymi atomami w bicyklo[*x.y.z*]alkanach ($x \geq y > z > 0$). Jeśli grupa jest zorientowana w kierunku mostka o najwyższej numeracji (mostek *z*, to znaczy C-7 w przykładzie poniżej), to otrzymuje deskryptor *egzo*; jeśli jest skierowana w kierunku przeciwnym do mostka o najwyższej numeracji - otrzymuje deskryptor *endo*. Jeśli grupa jest związana z mostkiem o najwyższej numeracji i zorientowana w kierunku mostka o najniższej numeracji (mostek *x*, na przykład C-2 w przykładzie poniżej) otrzymuje deskryptor *syn*; jeśli jest zorientowana w kierunku przeciwnym do mostka o najniższej numeracji - otrzymuje deskryptor *anti*. Patrz także *syn* i *anti*.



2-egzo-bromo-7- *syn*-fluoro-
bicyklo[2.2.1]heptan



2-endo-bromo-7- *anti*-fluoro-
bicyklo[2.2.1]heptan

egzo (exo)

Patrz *endo, egzo, syn, anti*.

ent (ent)

Przedrostek stosowany do wskazania enancjomeru produktu naturalnego czy zbliżonej molekule, której nazwa zwyczajowa odnosi się do jednego *enancjomeru*, np. *ent*-kauren jest nazwą enancjomeru kaurenu.

Epimery (*Epimers*)

Diastereoizomery różniące się *konfiguracją* tylko jednego spośród dwóch lub większej liczby tetraedrycznych centrów *stereogenicznych* w odpowiednich indywiduach molekularnych.

Epimeryzacja (*Epimerization*)

Przemiana jednego *epimeru* w drugi.

erythro, threo (erythro, threo)

Deskryptory diastereoizomerów acyklicznej struktury lub fragmentu struktury mającej dwa centra stereogeniczne. Notacja zaczerpnięta z nomenklatury węglowodanów]. Rozszerzenie tego systemu doprowadziło do sprzecznych interpretacji tych przedrostków. Zaleca się, aby w takich wypadkach stosować system *l,u* albo *R*,S**.

Etap desymetryzacji (*Desymmetrization Step*)

Usunięcie z molekule możliwie najmniejszej liczby elementów symetrii z

ograniczeniem [14] lub bez [15] do podstawienia punktowego.

● **Eutomer** (*Eutomer*)

Jeden z enancjomerów biologicznie czynnego związku odpowiedzialny całkowicie lub w głównej mierze za określony efekt biologiczny. Patrz *distomer*.

Forma skręcona (*Twist Form*)

Patrz *konformacja krzesłowa*, *konformacja łodziowa*, *konformacja skręcona*.

Gauche (*Gauche*)

Synonim terminu *synklinalny* w odniesieniu do ułożenia grup związanych z sąsiadującymi atomami.

Patrz także *kąt torsyjny*.

Grupa odniesienia (*Fiducial group*)

Patrz *helisowość* i *kąt torsyjny*.

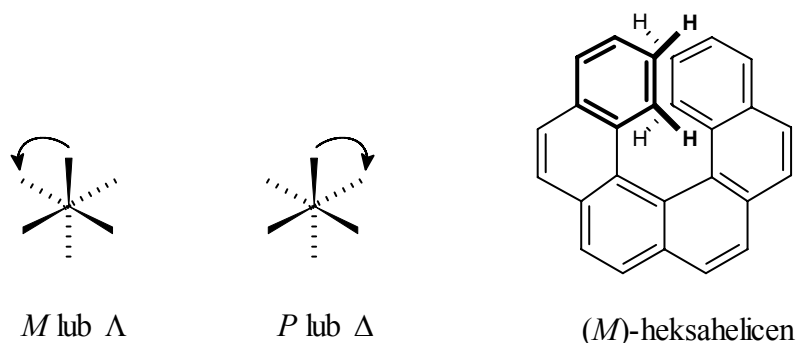
Grupa punktowa (*Point Group*)

Klasyfikacja elementów symetrii obiektu. W notacji Schoenflies'a oznaczana pisanymi kursywą symbolami takimi jak C_3 , D_2 , T_d itd.

Helisowość (*Helicity*)

Chiralność indywiduum molekularnego mającego kształt helisy, śmigła lub śruby. Prawoskrętna helisa jest oznaczana jako P (lub plus), a lewoskrętna jako M (lub

minus)



Zastosowanie tego systemu do opisu konformacji bierze pod uwagę *kąt torsyjny* pomiędzy dwoma określonymi grupami (grupami odniesienia) przyłączonymi do atomów połączonych tym wiązaniem. Znak mniejszego kąta torsyjnego pomiędzy grupami odniesienia definiuje sens chiralności helisy. Reguły wyboru grup odniesienia zgodnie z pierwszeństwem podane są przez Cahn, Ingolda i Preloga [18]. Patrz także *chiralność osiowa*, Δ (*delta*), Λ (*lambda*).

Heterotopowy (*Heterotopic*).

Patrz *stereoheterotopowy*.

● **Homochiralny** (*Homochiral*)

Odnosi się do obiektów, w tej liczbie molekuł, o takiej samej *ręczności*. Np. lewe buty, prawe ręce, L-aminokwasy.[16]

Patrz *enancjomerycznie czysty*.

Homomorficzny (*Homomorphic*)

Nakładające się ligandy nazywane są homomorficznymi.

Homotopowy (*Homotopic*)

Atomy lub grupy molekuly powiazane n -krotna osia symetrii ($n = 2,3$ itd.) nazywane sa homotopowymi. Np. chiralny kwas winowy (os C_2), chloroform (os C_3) i cykloheksaamyloza (α -cyklodekstryna, os C_6) maja, odpowiednio, dwie homotopowe grupy karbksylowe, trzy homotopowe atomy chloru i szesc homotopowych reszt D-glukozy.

Patrz *prochiralnosc*.

- **ic**

Patrz *kąt torsyjny*.

Indukcja asymetryczna (*Asymmetric Induction*)

Tradycyjny termin opisujacy preferencyjne powstawanie w reakcji chemicznej jednego z *enancjomerow* lub *diastereoizomerow* w wyniku wplywu chiralnoscii wystepujacej w substracie, reagentcie, katalizatorze lub srodowisku.

Indukcja, stereochemiczna (*Induction, Stereochemical*)

Patrz *indukcja asymetryczna*.

Indywiduum molekularne (*Molecular Entity*)

Jakikolwiek chemicznie lub izotopowo rozny atom, molekula, jon, para jonowa, rodnik, jonorodnik, kompleks, konformer itd., ktory moze byc zidentyfikowany jako odrębnie rozpoznawalne indywiduum. Od kontekstu zalezy, z jakim stopniem dokladnoscii indywiduum molekularne ma byc opisane. Np. „molekula wodoru” jest wlasciwa definicja pewnego indywiduum molekularnego do niektorych celow, podczas gdy dla innych celow moze byc konieczne rozroznienie stanow elektronowych i/lub stanow wibracyjnych i/lub spinu jadra itd. molekuly wodoru [3].

Interkonwersja krzesło-krzesło (*Interconversion chair-chair*)

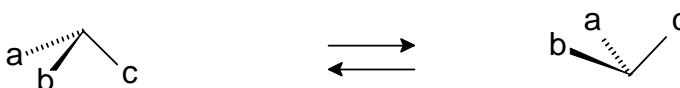
Patrz *inwersja pierścienia*.

Inwersja (*Inversion*)

1. Patrz *inwersja Waldena*.
2. Patrz *inwersja piramidy*.
3. Patrz *inwersja pierścienia*.
4. Operacja związana ze środkiem symetrii (*i*).

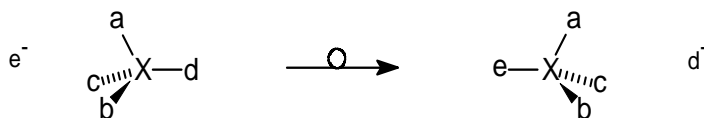
Inwersja piramidy (*Pyramidal Inversion*)

Politopowe przegrupowanie, w którym zmiana kierunku wiązań trójkoordynacyjnego atomu centralnego, mającego piramidalne ułożenie wiązań (ułożenie tripodalne), powoduje, że centralny atom (szczyt piramidy) zdaje się przemieścić do równocennego położenia po drugiej stronie podstawy piramidy. Jeśli trzy wiązania centralnego atomu są różne, inwersja piramidy powoduje interkonwersję enancjomerów.

**Inwersja Waldena** (*Walden Inversion*)

Retencja konfiguracji jest zachowaniem w trakcie reakcji chemicznej lub transformacji nienaruszonego rozmieszczenia w przestrzeni wiązań do centrum chiralności. Jest to również korelacja konfiguracji gdy rodzaj chemiczny $Xabcd$ jest przemieniony w rodzaj chemiczny $Xabce$ o tej samej *konfiguracji względnej*. Zmiana konfiguracji kiedy rodzaj chemiczny $Xabcd$ (gdzie X jest zazwyczaj atomem węgla) z tetraedrycznym ułożeniem wiązań do X jest przemieniony w rodzaj chemiczny $Xabce$ o przeciwnej konfiguracji względnej (lub ulega reakcji identyczności), w której powstające $Xabce$ ma przeciwną konfigurację) nazywa

się inwersją Waldena lub inwersją konfiguracji. Występowanie inwersji Waldena w trakcie chemicznej transformacji jest czasami wskazywane symbolem pokazanym poniżej zamiast zwykłej strzałki skierowanej od reagentów do produktów.



Izomer (*Isomer*)

Jeden z kilku rodzajów chemicznych (lub indywiduów molekularnych), które mają ten sam stechiometryczny wzór cząsteczkowy ale różne wzory konstytucyjne albo wzory stereochemiczne, a zatem mają różne właściwości fizyczne i/lub chemiczne.

Izomeria (*Isomerism*)

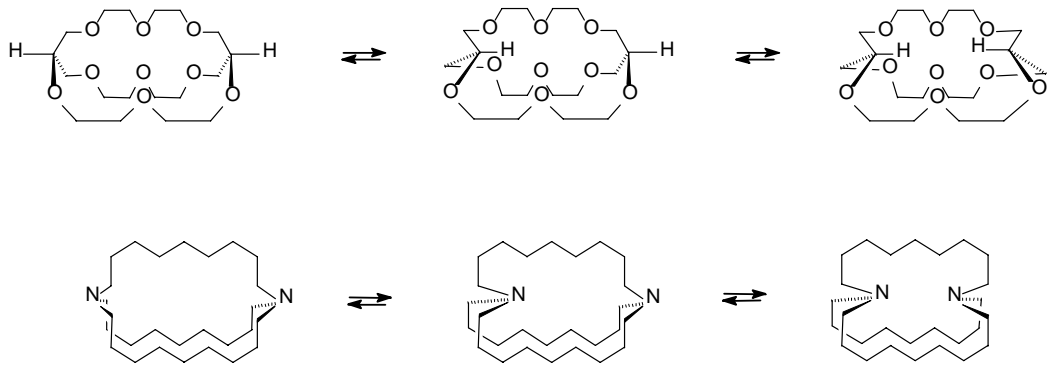
Relacje zachodzące pomiędzy *izomerami*.

Izomeryczny (*Isomeric*)

Przymiotnik wywodzący się od *izomeru*.

Izomeria dośrodkowo-odśrodkowa (*In-out Isomerism*)

Izomeria występująca w układach bicyklicznych mających mostki wystarczająco długie, aby możliwe było skierowanie wiązania bądź pary elektronów na atomie przyczółkowym na zewnątrz lub do wewnątrz struktury.



Izomeria geometryczna (*Geometric Isomerism*)

Przestarzały synonim terminu *izomeria cis-trans*.

Użycie zdecydowanie niewskazane.

Izomeria konstytucyjna (*Constitutional Isomerism*)

Izomeria pomiędzy strukturami różniącymi się *konstytucją* i opisanymi różnymi wzorami liniowymi, np. CH_3OCH_3 i $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$.

Izomeria optyczna (*Optical Isomerism*)

Używanie zdecydowanie niewskazane.

Dawniej synonim *stereoizomerów* z różnymi właściwościami optycznymi. Należy stosować terminy *stereoizomeria* lub *enancjomeria*.

Izomeria walencyjna (*Valence Isomerism*)

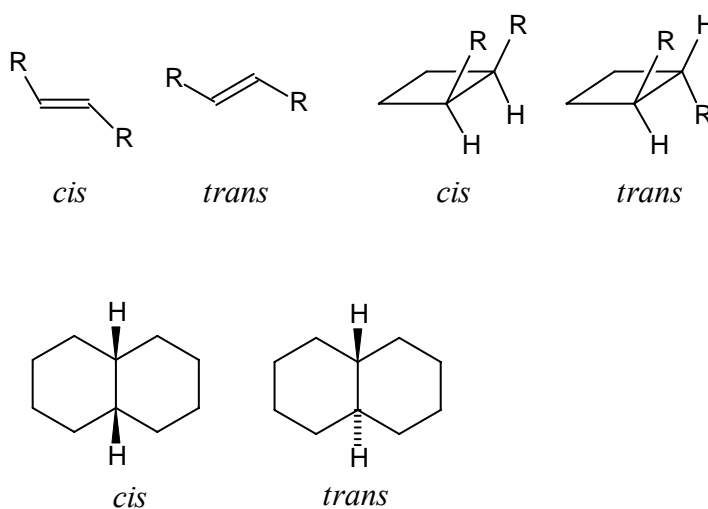
Patrz [3b].

Izomer odśrodkowy (*Out-Isomer*)

Patrz *izomeria dośrodkowo-odśrodkowa*.

Izomery *cis-trans* (*cis-trans Isomers*)

Stereoizomery olefin lub cykloalkanów (lub ich analogów zawierających heteroatomy) różniące się położeniem atomów (lub grup) w stosunku do płaszczyzny odniesienia. W izomerach *cis* podstawniki są po tej samej stronie, w izomerach *trans* są po przeciwnych stronach.



Izometryczny, anizometryczny (*Isometric, anisometric*)

Dwa indywidua molekularne, które są nakładające się lub mogą się stać nakładające po odbiciu jednej z nich w lustrze są izometryczne. W przeciwnym razie są anizometryczne.

Izotopomery (*Isotopomers*)

Izomery mające tę samą liczbę każdego z izotopów, ale różniące się ich położeniem. Termin jest skrótem określenia: izomery izotopowe. Izotopomery mogą być albo *izomerami konstytucyjnymi* (np. CH_2DCHO i CH_3CDO) albo *stereoizomerami* izotopowymi (np. (*R*) i (*S*)- CH_3CHDOH).

Jednostka stereogeniczna (albo stereogen lub stereoelement) (*Stereogenic Unit /or Stereogen or Stereoelement*)

Ugrupowanie w indywiduum molekularnym, które może być uznane jako ośrodek stereoizomerii. W każdym enancjomerze musi występować przynajmniej jeden taki ośrodek (aczkolwiek obecność jednostki stereogenicznej nie oznacza, że indywiduum molekularne musi być chiralne). Można wyróżnić trzy podstawowe typy jednostek stereogenicznych dla indywiduów molekularnych zawierających atomy z nie więcej niż czterema podstawnikami:

- (a) Ugrupowanie atomów zawierające centralny atom i rozróżnialne ligandy takie, że zamiana położeń dwóch podstawników prowadzi do stereoizomeru. Tradycyjnym przykładem takiej jednostki stereogenicznej jest atom asymetryczny (centrum chiralności)
- (b) Łańcuch czterech niekoplanarnych atomów (lub sztywnych grup) w trwałej konformacji takiej, że pomyślany albo rzeczywisty (ograniczony) obrót (ze zmianą znaku kąta torsyjnego) wokół centralnego wiązania prowadzi do stereoizomeru.
- (c) Ugrupowanie atomów zawierające podwójne wiązanie z podstawnikami, które powodują powstanie *izomerii cis-trans*.

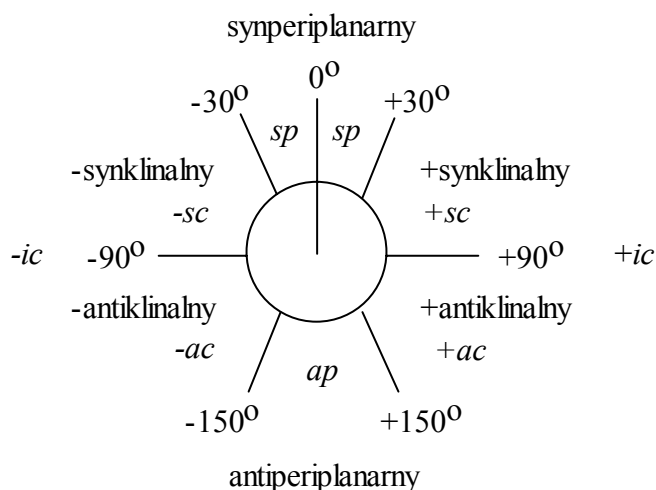
Kąt dwuścienny (*Dihedral Angle*)

Kąt pomiędzy dwoma przecinającymi się płaszczyznami na trzeciej płaszczyźnie normalnej do przecięcia się tych dwóch płaszczyzn. Patrz *kąt torsyjny*.

Kąt torsyjny (*Torsional Angle*)

W łańcuchu atomów A-B-C-D kąt dwuścienny pomiędzy płaszczyzną zawierającą atomy A,B,C i płaszczyzną zawierającą atomy B,C,D. W projekcji Newmana kąt torsyjny jest kątem (mającym bezwzględną wartość od 0° do 180°) pomiędzy wiązaniami skierowanymi do dwóch grup odniesienia, jednej związanej z atomem bliższym i drugiej związanej z atomem dalszym od obserwatora. Kąt torsyjny pomiędzy grupami A i D uznaje się za dodatni jeżeli obrót wiązania A-B zgodnie z ruchem wskazówki zegara o mniej niż 180° doprowadzi do jego nałożenia się z wiązaniem C-D; ujemny kąt torsyjny wymaga, dla osiągnięcia tego efektu, obrotu

w przeciwnym kierunku. Stereochemiczne ułożenie odpowiadające kątom torsyjnym pomiędzy 0° i $\pm 90^\circ$ nazywa się syn (s), kątom torsyjnym pomiędzy $\pm 90^\circ$ i 180° anti (a). Podobnie, ułożenie podstawników odpowiadające kątom torsyjnym pomiędzy -30° i -150° albo pomiędzy 30° i 150° nazywane jest klinalnym (c), a pomiędzy 0° i $\pm 30^\circ$ albo $\pm 150^\circ$ i 180° nazywane jest periplanarnym (p). Te dwa rodzaje terminów można połączyć tak, aby definiowały cztery zakresy katów torsyjnych: 0° do $\pm 30^\circ$ synperiplanarny (sp), 30° do 90° i -30° do -90° synklinalny (sc), 90° do 150° i -90° do -150° antyklinalny (ac), $\pm 150^\circ$ do 180° antiperiplanarny (ap). Ułożenie podstawników odpowiadające kątom torsyjnym $\neq 90^\circ$ nazywa się \neq izoklinalnym (+ic, -ic).



Konformacja synperiplanarna jest nazywana również *syn-* lub *cis-*konformacją; antiperiplanarna *anti* lub *trans*, a synklinalna *gauche* lub *skośną*. Dla makromolekuł zalecane jest używanie symboli T, C, G⁺, G⁻, A⁺ i A⁻ (odpowiadające, odpowiednio: ap, sp, +sc, -sc, +ac i -ac) [17].

Klinalny (Clinal)

Patrz *kąt torsyjny*.

Kompensacja (Compensation)

1. *wewnętrzna kompensacja* - patrz *związki mezo*.
2. *patrz zewnętrzna kompensacja*.

Konfiguracja (*Configuration*)

W odniesieniu do stereochemii termin jest ograniczony do rozmieszczenia atomów indywidualnego molekularnego w przestrzeni, odróżniającego *stereoizomery*; ich *izomeria* nie wynika z różnych *konformacji*.

Patrz także *konfiguracja absolutna*, *konfiguracja względna*.

Konfiguracja absolutna (*Absolute Configuration*)

Przestrzenne rozmieszczenie atomów chiralnego indywidualnego molekularnego (lub grupy), a także jego stereochemiczne deskryptory, np. *R* lub *S*. Patrz także *konfiguracja względna* i α (*alfa*), β (*beta*) (3).

Konformacja (*Conformation*)

Przestrzenne rozmieszczenie atomów powodujące powstanie stereoizomerów, które mogą ulegać interkonwersji w wyniku rotacji wokół formalnie pojedynczego wiązania. Niektórzy specjaliści rozszerzają znaczenie tego terminu na inwersję na centrach piramidy trygonalnej i inne *politopowe przegrupowania*. Patrz także *konformer*, *konformacja dwusieczna*, *konformacja naprzeciwległa*, *konformacja krzesłowa*, *konformacja łodziowa*, *konformacja skręcona*, *konformacja koronowa*, *konformacja kopertowa*, *konformacja półkrzesłowa*, *konformacja naprzemianległa*, *konformacja wannowa*.

Konformacja cisoidowa (*cisoid Conformation*)

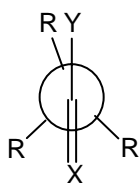
Termin zdecydowanie nie polecany)

Patrz *s-cis*, *s-trans*. Terminy *cisoidowy* i *transoidowy* są nadal używane do opisu stereochemii układów pierścieni skondensowanych. Patrz [1], reguła E-3.2.

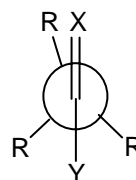
Konformacja dwusieczna, konformacja naprzeciwległa (*Bisecting Conformation, Eclipsing Conformation*)

Dla struktury zawierającej ugrupowanie $R_3C-C(Y)=X$ (z identycznymi lub różnymi grupami R) konformacja, w której *kąt torsyjny* jest taki, że X jest

antiperiplanarne do jednej z grup R i w *projekcji Newmana* podwójne wiązanie C=X dzieli na połowy jeden z kątów R-C-R nazywa się konformacją dwusieczną. W tej konformacji wiązanie C-Y *nakłada się* z jednym z wiązań C-R. Inna konformacja, w której X jest *synperiplanarne* do jednej z grup R nazywa się konformacją naprzeciwległą.



konformacja dwusieczna



konformacja naprzeciwległa

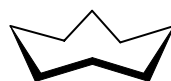
Konformacja kopertowa (*Envelope Conformation*)

Konformacja (należąca do grupy symetrii C_s) pierścienia pięciocząłowego, w której cztery atomy znajdują się w jednej płaszczyźnie, a jeden atom (klapa) leży poza tą płaszczyzną.



Konformacja koronowa (*Crown Conformation*)

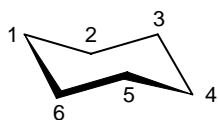
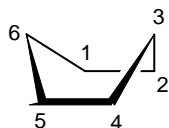
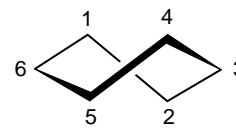
Konformacja nasyconego, cyklicznego indywiduum molekularnego, zawierającego parzystą liczbę ($\exists 8$) atomów w pierścieniu, w którym te atomy leżą na przemian w jednej z dwóch równoległych płaszczyzn i są symetrycznie równocenne (D_{4d} dla cyklooktanu, D_{5d} dla cyklodekanu itd.). Jest ona analogiczna do *konformacji krzesłowej* cykloheksanu. Patrz także *konformacja wannowa*.



Konformacja krzesłowa, konformacja łodziowa, konformacja skręcona (*Chair, Boat, Twist*)

Jeżeli atomy węgla 1, 2, 4 i 5 cykloheksanu leżą w jednej płaszczyźnie, a atomy 3 i 6 znajdują się po przeciwnych stronach tej płaszczyzny to *konformacja* pierścienia (o symetrii D_{3d}) nazywana jest formą krzesłową. Tym samym terminem określa się podobne konformacje nasyconych pierścieni sześciocząłowych zawierających heteroatom i/lub mających podstawniki, ale te konformacje mogą być odkształcone od symetrii ściśle D_{3d} . Dla cykloheksanu i większości jego analogów forma krzesłowa jest najstabilniejszą konformacją. Jeżeli konformacja cykloheksanu nie ma środka symetrii, natomiast ma dwie płaszczyzny symetrii - jedną, przecinającą wiązania pomiędzy atomami 1 i 2 oraz pomiędzy atomami 4 i 5 i drugą, przechodzącą przez atomy 3 i 6 (leżące poza, ale po jednej stronie płaszczyzny wyznaczonej przez atomy 1,2, 4, i 5) to ta konformacja (należąca do grupy symetrii C_{2v}) jest nazywana formą łodziową i na ogół jest formą niestabilną. I w tym przypadku termin łódź używany jest w odniesieniu do strukturalnych analogów.

Konformacja o symetrii D_2 pojawiająca się w trakcie interkonwersji dwóch form łodziowych cykloheksanu jest nazywana formą skręconą (czasami także skośną łodzią, formą skośną lub formą rozciągniętą). Patrz także półkrzesło.

krzesło (D_{3d})łódź (C_{2v})forma skręcona (D_2)

W pierścieniu pięciocząłowym konformacja, w której dwa sąsiadujące atomy są maksymalnie odsunięte w przeciwnych kierunkach od płaszczyzny wyznaczonej przez trzy pozostałe atomy węgla, była nazywana półkrzesłem. Lepiej nazywać ją konformacją skręconą (patrz także *konformacja kopertowa*).

W chemii węglowodanów termin konformacja skręcona odnosi się do pierścienia pięciocząłowego, a konformację pierścienia sześciocząłowego o symetrii D_2 określa się jako skośną.

Konformacja łodziowa (Boat).

Patrz *Konformacja krzesłowa, konformacja łodziowa, konformacja skręcona i konformacja półkrzesłowa, półłodziowa.*

Konformacja naprzeciwległa (*Eclipsing Conformation*)

Patrz konformacja dwusieczna.

Konformacja naprzemianległa (*Staggered Conformation*)

Konformację grup związanych z dwoma sąsiadującymi atomami określa się jako naprzemianległą jeżeli kąty torsyjne są takie, że grupy znajdują się w maksymalnym oddaleniu od ułożenia *naprzeciwległego*.

Konformacja skośna (*Skew*)

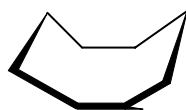
Patrz kąt torsyjny oraz konformacja krzesłowa, konformacja łodziowa, konformacja skręcona.

Konformacja transoidowa (*transoid Conformation*)

Używanie terminu zdecydowanie niewskazane. Patrz *s-cis*, *s-trans*. Stosowanie *transoid* jako stereodeskryptora patrz *cisoid*.

Konformacja wannowa (*Tub Conformation*)

Konformacja (o symetrii D_{2d}) ośmioczłonowego pierścienia, w której cztery atomy tworzą jedną parę leżących naprzeciw siebie w jednej płaszczyźnie wiązań, a wszystkie pozostałe atomy pierścienia leżą po jednej stronie tej płaszczyzny. Jest ona analogiczna do konformacji łodziowej cykloheksanu. patrz także konformacja koronowa.

**Konformer** (*Conformer*)

Jeden ze zbioru *stereoizomerów*, z których każdy charakteryzuje się *konformacją* odpowiadającą określonemu minimum energii potencjalnej. Patrz także *rotamer*.

Konglomerat (*Conglomerate*)

Patrz *konglomerat racemiczny*.

Konglomerat racemiczny (*Racemic Conglomerate*)

Równomolowa mechaniczna mieszanina kryształów, z których każdy zawiera tylko jeden z dwóch *enancjomerów* występujących w *racemacie*. Proces jej powstawania podczas krystalizacji racematu nazywany jest spontanicznym rozszczepieniem, ponieważ czyste lub prawie czyste enancjomery można otrzymać z konglomeratu przez sortowanie kryształów

Konstytucja (*Constitution*)

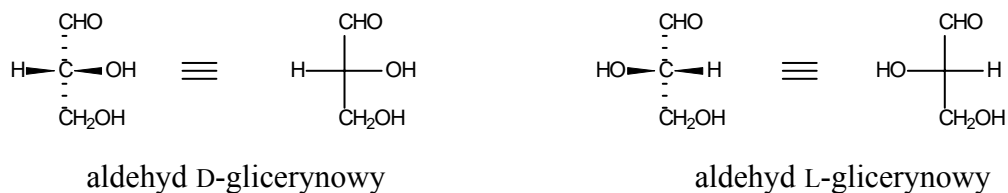
Opis rodzaju i połączeń (i krotności odpowiednich wiązań) atomów w indywiduum molekularnym, z pominięciem jakichkolwiek różnic wynikających z ich rozmieszczenia w przestrzeni.

Kontrola stereoelektronowa (*Stereoelectronic Control*)

Wpływ czynników elektronowych na charakter produktów reakcji chemicznej (lub jej szybkość). Termin ten jest zwykle stosowany w ramach przybliżeń orbitalnych. Zmiany energii orbitali molekularnych ze zmianą względnej geometrii jąder (wzdłuż współrzędnej reakcji) są rozważane jako następstwo zmiany nakładania się składowych orbitali [3].

Konwencja Fischera-Rosanoff'a (lub konwencja Rosanoff'a) (*Fischer-Rosanoff Convention or Rosanoff Convention*)

Arbitralnie przyjęta konwencja, według której aldehyd (+)-glicerynowy, o którym wiemy obecnie, że jest (*R*)-2,3-dihydroksypropanalem, nazwano aldehydem D-glicerynowym (jego enancjomer to aldehyd L-glicerynowy, a racemat - aldehyd DL-glicerynowy) zakładając, że ma absolutną konfigurację przedstawioną przez *projekcję Fischera* pokazaną poniżej:



Atom, który zgodnie z ogólnymi regułami nomenklatury ma lokant 1, jest zwyczajowo umieszczany na górze narysowanego pionowo głównego łańcucha, a inne grupy rysuje się po obu stronach tego łańcucha. Ta konwencja jest nadal stosowana dla cukrów i aminokwasów.

Konwencja Rosanoff'a (*Rosanoff Convention*)

Patrz *konwencja Fischera-Rosanoff'a*.

L (*L*)

Patrz *D, L, DL*.

l (*l*)

1. Przestarzały przedrostek dla (-), patrz *d, l, dl*.
2. Patrz *l, u* - symbole dla diastereoizomerów „like” i „unlike”.

l, u (*l, u*)

Stereodeskryptory diastereoizomerów z dwoma elementami chiralności. Gdy dwa elementy chiralności są oba (*R*) albo oba (*S*) w indywiduum molekularnym występuje relacja *l* (*l = like*), a jeśli jeden element chiralności jest *R* a drugi *S* w indywiduum molekularnym występuje relacja *u* (*u = unlike*). Zapis ten może być rozszerzony na molekuly mające więcej niż dwa elementy chiralności, w których relacje *l, u* elementów chiralności rozważa się parami [19].

Λ (Lambda) [Λ (Lambda)]

Patrz Δ (delta).

Labilny optycznie (Optically Labile)

Termin odnosi się do układu, w którym stereoizomeryzacja powoduje zmianę w czasie wartości skręcalności optycznej. Patrz *mutarotacja*.

Stosowanie zdecydowanie niewskazane.

M (M)

Patrz *helisowość*.

Masztowy (Flagpole)

Patrz *bukszprytowy, masztowy*.

***mezo* (meso)**

Przedrostek wskazujący obecność elementu symetrii drugiego rodzaju (patrz *chiralność*) w rodzaju chemicznym, który jest zwykle jednym ze zbioru *diastereoizomerów*, w skład którego wchodzi też związki chiralne. Patrz związek *mezo*.

Mieszanina racemiczna (Racemic Mixture)

Używanie tego terminu jest zdecydowanie niewskazane. Jest on mylący, ponieważ był używany zarówno jako synonim *racematu* jak i *racemicznego konglomeratu*.

Minus (Minus)

Patrz *plus, minus*.

Mutarotacja (*Mutarotation*)

Zmiana skręcalności optycznej towarzysząca *epimeryzacji*. W chemii cukrów termin odnosi się zwykle do epimeryzacji na hemiacetalowym atomie węgla.

Nadmiar diastereoizomeru/ nadmiar diastereoizomeryczny (*Diastereoisomer Excess/Diastereoisomeric Excess*)

Jest definiowany analogicznie do nadmiaru enancjomeru, jako $D_1 - D_2$, a procentowy nadmiar diastereoizomeru jako $100(D_1 - D_2)$, gdzie D_1 i D_2 ($D_1 + D_2 = 1$) są uławkami molowymi dwóch diastereoizomerów w mieszaninie albo uławkowymi wydajnościami dwóch diastereoizomerów powstających w reakcji. Termin nie może być stosowany do mieszanin zawierających więcej niż dwa diastereoizomery. Często ten termin jest skrącany do *d.e.* Patrz *stereoselektywność* i *diastereoizomeria*.

Nadmiar enancjomeru / Nadmiar enancjomeryczny (*Enantiomer Excess/Enantiomeric Excess*)

Dla mieszaniny (+) i (-)-enancjomerów o składzie danym jako ułamki molowe lub wagowe $F_{(+)}$ i $F_{(-)}$ (gdzie $F_{(+)} + F_{(-)} = 1$) nadmiar enancjomeru jest definiowany jako $|F_{(+)} - F_{(-)}|$ (a procent nadmiaru enancjomeru jako $100|F_{(+)} - F_{(-)}|$). Często ten termin jest oznaczany skrótem *e.e.* Patrz *czystość optyczna*.

Nakładający się, nakładanie się (*Eclipsed, Eclipsing*)

Dwa atomy lub grupy związane z sąsiadującymi atomami są nakładające się jeśli *kąt torsyjny* pomiędzy trzema wiązaniami jest równy lub bliski 0. Patrz *konformacja dwusieczna, napięcie nakładania się*.

Nakładalność (*Superposability*)

Zdolność do doprowadzenia dwóch określonych wzorów stereochemicznych (albo modeli) do zbieżności wyłącznie przez przesunięcie i sztywny obrót (aby były dokładnie nakładające się w przestrzeni i aby odpowiednie jednostki molekularne lub obiekty były dokładnymi swymi replikami).

Napięcie Baeyera (Baeyer Strain)

Patrz napięcie kątowe.

Napięcie kątowe (*Angle Strain*)

Napięcie wynikające z odchylenia kątów pomiędzy wiązaniami od „normalnych” wartości. Termin jest często używany w odniesieniu do niearomatycznych związków cyklicznych, w których wewnętrzny kąt różni się od regularnego kąta tetraedrycznego $109^{\circ}28'$; w tym znaczeniu napięcie kątowe jest również znane jako napięcie Bayera.

Napięcie nakładania się (*Eclipsing Strain*)

Wewnątrzcząsteczkowe napięcie występujące na skutek *oddziaływania bezwiązanowego* pomiędzy *nakładającymi się* atomami lub grupami. Jest to, na przykład, jedno z oddziaływań odpowiedzialnych za występowanie *bariery rotacji*, a więc *ograniczonej rotacji* wokół wiązania C-C w etanie. Było nazywane również napięciem Pitzera, napięciem torsyjnym i napięciem wiązań naprzeciwległych.

Napięcie Pitzera (*Pitzer Strain*)

Patrz *napięcie nakładania się*.

Napięcie steryczne (*Steric Strain*)

1. Patrz napięcie [3]
2. Patrz *napięcie kątowe*.
3. Patrz *napięcie nakładania się*.

4. Patrz *napięcie transanularne*.

Napięcie torsyjne (*Torsional Strain*)

Patrz *napięcie nakładania się*.

Napięcie wiązań naprzeciwnych (*Bond Opposition Strain*)

Patrz *napięcie nakładania się*.

Napięcie transanularne (*Transannular Strain*)

W związkach z pierścieniem o średniej wielkości napięcie wynikające z odpychającego *bezwiazaniowego oddziaływania* pomiędzy podstawnikami lub atomami wodoru związanymi z nie sąsiadującymi ze sobą atomami pierścienia.

● **Nieracemiczny** (*Nonracemic*)

Probkę substancji, w której jeden z enancjomerów występuje w nadmiarze w stosunku do drugiego określa się jako nieracemiczną. W tym znaczeniu terminu “skalemiczny” nie poleca się.[16]

Oddziaływania bezwiazaniowe (*Nonbonded Interactions*)

Wewnątrzcząsteczkowe przyciąganie lub odpychanie pomiędzy nie związanymi bezpośrednio atomami, wpływające na termodynamiczną stabilność rozpatrywanego rodzaju chemicznego. Patrz także *napięcie nakładania się*, *napięcie transanularne*.

Odwrócenie pierścienia (albo inwersja pierścienia) (*Ring reversal /or ring inversion/*)

Interkonwersja, poprzez obrót wokół pojedynczych wiązań (połączony z deformacją kątów w stanie przejściowym), cyklicznych konformacji mających ten sam kształt pierścienia (np. krzesło → krzesło), ale niekoniecznie równocenne rozmieszczenie podstawników w przestrzeni (np. ekwatorialny → aksjalny).

Ograniczona rotacja (*Restricted Rotation*)

Patrz *swobodna rotacja, zahamowana rotacja*.

Oś chiralności (*Chirality axis, Axis of Chirality*)

Oś, wokół której utrzymywany jest zespół ligandów w taki sposób, że ich rozmieszczenie w przestrzeni jest nienakładające się z jego odbiciem lustrzanym. Np. w allenie $abC=C=Ccd$ oś chiralności jest określona wiązaniami $C=C=C$, a w *orto*-podstawionych bifenylach oś chiralności wyznaczona jest przez atomy C-1, C-1', C-4 i C-4'.

Oś helisowości (*Axis of Helicity*)

Patrz *helisowość*.

Periplanarny (*Periplanar*)

Patrz *kąt torsyjny*.

Pierwszeństwo (*Priority*)

Patrz *pierwszeństwo CIP*.

Pierwszeństwo CIP (*CIP Priority*)

W regułach CIP przyjęty porządek ligandów został ustalony w celu jednoznacznego oznaczenia *stereoizomerów*. Porządek ten ustala się na podstawie reguł pierwszeństwa, miarodajnie przedstawionych w [18] i [19].

Plus, Minus (*Plus, Minus*)

Patrz 1. *d, l, dl* dla (+), (-) i (\pm)

2. *helisowość* dla *P* i *M*.

Płaszczyzna chiralności (*Chirality Plane*)

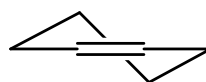
Zlokalizowany na płaszczyźnie fragment cząsteczki połączony z sąsiadującą częścią struktury wiązaniem ograniczającym możliwość obrotu tak, że płaszczyzna nie może leżeć w płaszczyźnie symetrii. Np. w (*E*)-cyklooktenie płaszczyzna chiralności zawiera atomy węgla podwójnego wiązania i wszystkie cztery związane z nim atomy; w monopodstawionym paracyklofanie płaszczyzna chiralności obejmuje monopodstawiony pierścień benzenowy z trzema atomami wodoru i trzy inne atomy związane z pierścieniem (to znaczy należące do podstawnika i dwóch łańcuchów łączących dwa pierścienie benzenowe).

P,M (*P,M*)

Patrz *helisowość*.

Półkrzesło (*Half-chair*)

Konformacja sześcioczłonowej struktury pierścieniowej, w której cztery sąsiadujące atomy pierścienia leżą w jednej płaszczyźnie, a dwa pozostałe atomy znajdują się po przeciwnych stronach tej płaszczyzny nazywana jest półkrzesłem. Patrz także *konformacja krzesłowa*, *konformacja łodziowa*, *konformacja skręcona*.



Procentowy nadmiar diastereoizomeru (*Percent Diastereoisomer Excess*)

Patrz *nadmiar diastereoizomeru*.

Procentowy nadmiar enancjomeru (*Percent Enantiomer Excess*)

Patrz *nadmiar enancjomeru*.

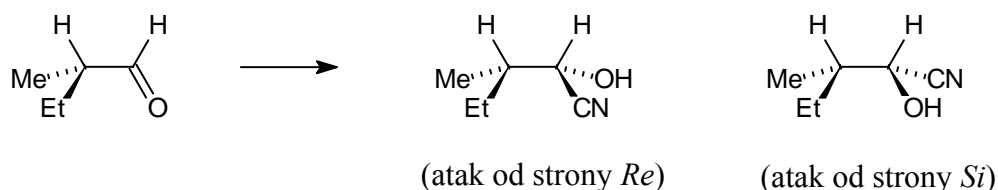
Prochiralność (*Prochirality*)

Termin używany w różnych, czasami sprzecznych znaczeniach; cztery podane są poniżej.

1. Właściwość geometryczna achiralnego obiektu (lub przestrzennego rozmieszczenia atomów lub punktów), który może stać się *chiralny* w następstwie jednego kroku *desymetryzacji*. Achiralne indywiduum molekularne lub jego część rozważana odrębnie nazywana jest prochiralną, jeśli można ją uczynić chiralną przez wymianę występującego w niej atomu (lub achiralnej grupy) przez jakąkolwiek inną niż z nią związane.

Achiralny obiekt, który może stać się chiralnym w dwóch krokach dyssymetryzacji jest czasami określany jako proprochiralny. Np. proprochiralny $\text{CH}_3\text{-CO}_2\text{H}$ staje się prochiralny jako $\text{CH}_2\text{D-CO}_2\text{H}$ i chiralny jako $\text{CHDT-CO}_2\text{H}$

2. Termin prochiralność stosowany jest także do achiralnej molekuly lub indywiduum zawierającego układ trygonalny, który można uczynić chiralnym przez dodanie do trygonalnego układu innego atomu lub achiralnej grupy. Np. addycja atomów wodoru do jednej z enancjotopowych stron prochiralnego ketonu $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCH}_3$ daje jeden z enancjomerów chiralnego alkoholu $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHOHCH}_3$; addycja CN^- do jednej z *diastereotopowych* stron grupy karbonylowej pokazanego niżej chiralnego aldehydu przemienia go w jeden z diastereoizomerów cyjanohydryny. Dwie strony układu trygonalnego mogą być określone jako *Re* i *Si*.



3. Termin prochiralny stosowany jest również do tetraedycznego atomu achiralnej lub chiralnej molekuly, który jest związany z dwoma

stereotopowymi grupami. Np. prochiralna molekula $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ może być przemieniona w chiralną molekulę CH_3CHDOH przez wymianę izotopową jednego z dwóch enancjotopowych atomów wodoru grupy metylenowej. Atom węgla grupy metylenowej jest nazywany prochiralnym. Prochiralna molekula $\text{HO}_2\text{CCH}_2\text{CHOHCH}_2\text{CO}_2\text{H}$ może być przemieniona w chiralny produkt przez estyfikację jednej z dwóch enancjotopowych grup $-\text{CH}_2\text{CO}_2\text{H}$. Atom węgla grupy $-\text{CHOH}$ jest nazywany prochiralnym. Chiralna molekula $\text{CH}_3\text{CHOHCH}_2\text{CH}_3$ może być przemieniona w jeden z diastereoizomerów molekuly $\text{CH}_3\text{CHOHCHDCH}_3$ przez wymianę izotopową jednego z dwóch *diastereotopowych* atomów wodoru grupy metylenowej. Atom węgla grupy metylenowej jest nazywany prochiralnym. Stereoheterotopowe grupy w tych wypadkach mogą być określone jako *pro-R* lub *pro-S*. Mówienie o samych grupach stereoheterotopowych jako prochiralnych, aczkolwiek częste, jest zdecydowanie niepolecane. Patrz *centrum chiralności*.

4. Termin prochiralność jest stosowany również w odniesieniu do enancjotopowych stron układu trygonalnego.

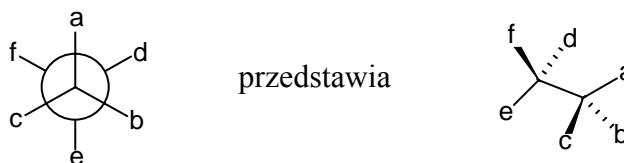
pro-E, pro-Z (pro-E, pro-Z)

Jedną z pary identycznych grup c przyłączonych do podwójnego wiązania (jak w $\text{abC}=\text{Cc}_2$) określa się jako *pro-E*, gdy przypisano jej *pierwszeństwo wg CIP* względem drugiej grupy c , a *stereodeskryptorem* molekuly będzie *E*. Druga grupa c jest określana jako *pro-Z*.

Projekcja Newmana (*Newman Projection*)

Wzór rzutowy przedstawiający przestrzenne rozmieszczenie wiązań dwóch sąsiadujących ze sobą atomów w indywiduum molekularnym. Strukturę przedstawia się jako widzianą wzdłuż wiązania łączącego te dwa atomy, a wiązania biegnące od nich do pozostałych podstawników są rysowane jako rzuty na płaszczyźnie papieru. Wiazania atomu bliższego do patrzącego są rysowane tak, że spotykają się w środku okręgu przedstawiającego ten atom. Wiazania

atomu bardziej oddalonego rysuje się jako wystające spoza okręgu.



Projekcja Fischera (lub projekcja Fischera-Tollensa) (*Fischer Projection or Fischer-Tollens projection*)

Projekcja wzoru, w której przyjmuje się, że wiązania narysowane pionowo znajdują się pod płaszczyzną rzutu, a wiązania poziome - ponad tą płaszczyzną. Tak więc dla molekuly Cabcd:



Prochiralność (*Prochirality*)

Patrz *prochiralność*.

pro-R, pro-S (*pro-R, pro-S*)

Stereoheterotopową grupę c w tetraedycznym związku $Xabc_2$ określa się jako *pro-R* jeżeli, po przypisaniu jej *pierwszeństwa* wg *CIP* w stosunku do drugiej grupy stereoheterotopowej, powstałemu centrum chiralności przypiszemy *stereodeskryptor R*. Druga grupa c jest oznaczana jako *pro-S*. Ta metoda dla rozróżniania pomiędzy grupami stereoheterotopowymi może być stosowana do innych typów *prochiralnych* indywidualów molekularnych lub do rozważanych odrębnie *prochiralnych* części indywidualów molekularnych. Patrz *centrum prochiralności*.

Przegrupowanie politopowe (*Polytopal Rearrangement*)

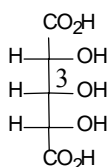
Stereoizomeryzacja zamieniająca miejscami różne lub równocenne rozmieszczenia w przestrzeni ligandów wokół atomu centralnego lub klatki atomów, gdzie ligandy lub klatka wyznaczają naroża wielościanu. Na przykład *inwersja piramidy* w aminach, *pseudorotacja Berry'ego* PF_5 , przegrupowanie poliheдрыcznych boranów [20].

Pseudo-aksjalny (*Pseudo-axial*)

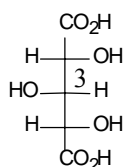
Patrz *aksjalny*, *ekwatorialny*.

Pseudo-asymetryczny atom węgla (*Pseudo-asymmetric Carbon Atom*)

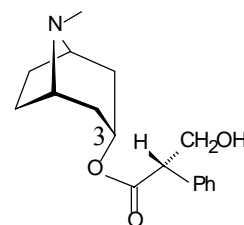
Tradycyjna nazwa tetraedrycznie skoordynowanego atomu węgla związanego z czterema różnymi jednostkami, z których dwie, i tylko dwie, mają tę samą konstytucję, ale przeciwny sens chiralności. Deskryptory pseudoasymetrycznego atomu węgla *r/s* nie ulegają zmianie w wyniku odbicia w płaszczyźnie lustrzanej (tzn. *r* pozostaje *r*, a *s* pozostaje *s*), ale ulegają odwróceniu przez wymianę pozycji dowolnych dwóch jednostek związanych z pseudoasymetrycznym atomem węgla (tzn. *r* staje się *s*, a *s* staje się *r*). Przykładami są C-3 w kwasie rybarowym (C-3 jest *r*), kwasie ksylarowym (C-3 jest *s*) i w hioscyaminie (C-3 jest *r*). Można pominąć myślnik w słowie pseudo-asymetryczny.



kwas rybarowy



kwas ksylarowy



hioscyamina

Pseudo-ekwatorialny (*Pseudo-equatorial*)

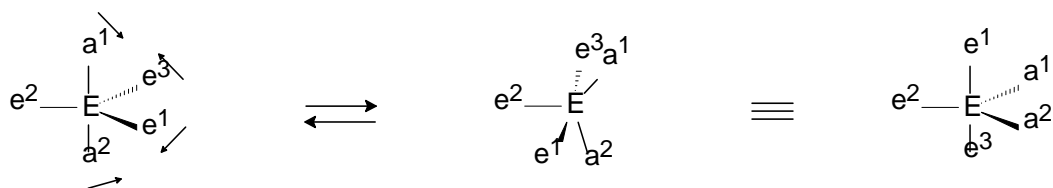
Patrz *aksjalny, ekwatorialny*.

Pseudorotacja (*Pseudorotation*)

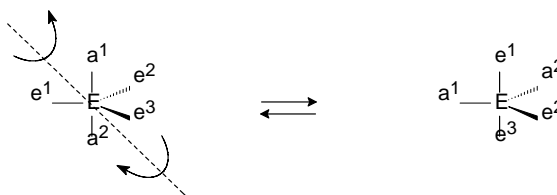
Stereoizomeryzacja zachodząca w strukturze, wynikiem której jest takie ułożenie, jak gdyby wyjściowa molekula w całości poddana została obrotowi do położenia *nakładającego się* z początkowym. Nakładanie się możliwe jest tylko wówczas, gdy nie występują różnice (włączając podstawienie izotopowe) między podstawnikami.

Jednym z przykładów pseudorotacji jest łatwa interkonwersja, w wyniku wychylania się atomów węgla poza płaszczyznę pierścienia, pomiędzy wieloma kopertowymi i skręconymi konformacjami cyklopentanu.

Innym przykładem pseudorotacji (pseudorotacja Berry'ego) jest politopowe przegrupowanie wyjaśniające mechanizm wewnątrzcząsteczkowej izomeryzacji związków o strukturze bipyramidy trygonalnej (np. λ^5 -fosfanów). Pięć wiązań centralnego atomu E oznaczonych jest symbolami e^1 , e^2 , e^3 , a^1 i a^2 . Dwa *ekwatorialne wiązania* oddalają się od siebie i stają się *apikalnymi* wiązaniami, a jednocześnie wiązania apikalne zbliżają się do siebie aż staną się ekwatorialnymi.



Zbliżona przemiana konformacyjna struktury bipyramidy trygonalnej opisywana jest jako rotacja kołowrotowa. Proces może być przedstawiony w następujący sposób. Apikalne i ekwatorialne wiązanie obracane są jako para o około 120° w stosunku do trzech pozostałych wiązań (Istnieją wątpliwości, czy mechanizm taki jest w rzeczywistości możliwy).



Quasi-aksjalny (*Quasi-axial*)

Patrz *aksjalny*, *ekwatorialny*.

Quasi-ekwatorialny (*Quasi-equatorial*)

Patrz *aksjalny*, *ekwatorialny*.

Quasi-enancjomery (*Quasi-enantiomers*)

Konstytucyjnie różne, ale ściśle zbliżone do siebie rodzaje chemiczne, np. MX i MY, mające przeciwny sens chiralności dużego identycznego chiralnego fragmentu M nazywane są quasi-enancjomerami. Np. (*R*)-2-bromobutan jest quasi-enancjomerem (*S*)-2-chlorobutanu. Patrz także *quasi-racemiczny związek*.

r,s (*r,s*)

Stereodeskryptory *pseudo-asymetrycznego atomu*. Odnośniki w haśle *R,S*.

R,S (*R,S*)

Przyjęte oznaczenie (opracowane przez Cahn, Ingolda i Preloga) konfiguracji absolutnej czterokoordynacyjnego (quadriligant) i sześciokoordynacyjnego (sexiligant) centrum stereogenicznego. Zastosowanie tych stereodeskryptorów w systematycznej nomenklaturze chemicznej opisane jest w [18] i [19].

R_p, S_p (R_p, S_p)

Patrz *chiralność planarna*.

R^*, S^* (R^*, S^*)

Patrz *konfiguracja względna*.

Rac (*rac*)

Patrz *racemat*.

Racemat (*Racemate*)

Równomolowa mieszanina pary *enancjomerów*. Nie wykazuje *czynności optycznej*. Nazwę chemiczną lub wzór racematu odróżnia się od enancjomerów przedrostkiem (\pm) lub *rac-* (albo *racem-*) lub symbolami *RS* i *SR*.

Racemiczny (*Racemic*)

Odnoszący się do *racematu*.

Racemizacja (*Racemization*)

Wytwarzanie *racematu* z *chiralnego* materiału wyjściowego, w którym jeden *enancjomer* występuje w nadmiarze.

Re, Si (Re, Si)

Stereoheterotopowa strona trygonalnego atomu jest oznaczana *Re* jeżeli ligandy trygonalnego atomu uporządkowane wg pierwszeństwa CIP układają się, gdy patrzymy w kierunku rozważanej strony, w kolejności zgodnej z ruchem wskazówek zegara. Przeciwne uporządkowanie jest określane *Si*.

Patrz także *enancjotopowy* i przykład przy terminie *prochiralność*.

Reguła Bredt'a (*Bredt's Rule*)

Patrz [3].

Reguły następstwa (*Sequence Rules*)

Patrz *pierwszeństwo*.

rel (*rel*)

Patrz *konfiguracja względna*.

Retencja konfiguracji (*Retention of Configuration*)

Patrz *inwersja Waldena*.

Ręczność (*Handedness*)

Termin używany w dwóch znaczeniach, *chiralność* albo *sens chiralności*.

Rodzaj chemiczny (*Chemical species*)

Zbiór chemicznie identycznych atomowych lub molekularnych jednostek strukturalnych w stałym uporządkowaniu albo chemicznie identyczne *indywidua molekularne*, które mogą przybierać ten sam zbiór poziomów energii molekularnej w tej samej skali czasu eksperymentu.

Na przykład dwa izomery konformacyjne mogą ulegać interkonwersji na tyle wolno, że będą wykrywalne na podstawie odrębnych widm NMR, a zatem są odrębnymi rodzajami chemicznymi w skali czasu określonej częstotliwością promieniowania elektromagnetycznego użytego spektrometru. Z drugiej strony w powolnej reakcji chemicznej ta sama mieszanina konformerów może zachowywać się jak pojedynczy rodzaj chemiczny, to znaczy występuje w rzeczywistości zupełne równowagowanie populacji całkowitego zbioru molekularnych poziomów energetycznych należących do dwóch konformerów.

Jeżeli z kontekstu nie wynika inaczej, przyjmuje się, że termin odnosi się do indywiduów molekularnych zawierających izotopy w naturalnym składzie [3].

Rotacja kołowrotowa (*Turnstile Rotation*)

Patrz *pseudorotacja*.

Rotamer (*Rotamer*)

Jeden ze zbioru konformerów powstających w wyniku *ograniczonej rotacji* wokół pojedynczego wiązania.

Rozkład asymetryczny (*Asymmetric Destruction*)

Patrz *rozszczerzenie kinetyczne*.

Rozszczerzenie (*Resolution*)

Rozdział *racematu* na składowe *enancjomery*. Patrz także *rozszczerzenie kinetyczne*, *konglomerat racemiczny*.

Rozszczerzenie kinetyczne (*Kinetic Resolution*)

Osiągnięcie częściowego lub całkowitego *rozszczerzenia* dzięki różnym szybkościom reakcji *enancjomerów* w *racemacie* z *chiralnym* czynnikiem (reagent, katalizator, rozpuszczalnik itd.).

Rozszczerzenie optyczne (*Optical Resolution*)

Stosowanie tego terminu jest zdecydowanie niewskazane.

Patrz *rozszczerzenie*.

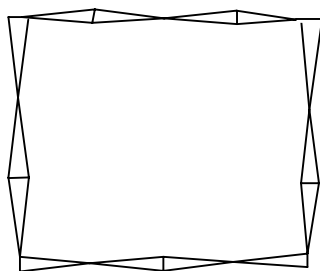
RS (*RS*)

Patrz *racemat*.

Rzut klinowy (*Wedge Projection*)

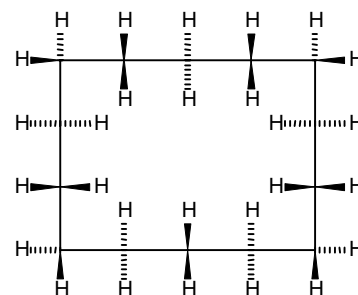
Rzut stereochemiczny, z grubsza w średniej płaszczyźnie molekuly, w którym wiązania są przedstawiane przez otwarte kliny, zwięzające się od bliższego atomu

do atomu bardziej oddalonego [21]. Rzut klinowy jest głównie stosowany do zobrazowania konformacji dużych pierścieni cykloalkanów, np. cyklotetradekanu.



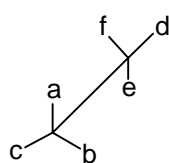
rzut klinowy

równoważne z

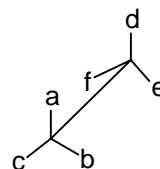


Rzut konikowy (*Sawhorse Projection*)

Wzór perspektywiczny wskazujący rozmieszczenie w przestrzeni wiązań dwóch sąsiadujących ze sobą atomów węgla. Wiązanie pomiędzy dwoma atomami jest przedstawiane przekątną kreską, której lewy dolny koniec określa miejsce atomu bliższego obserwatorowi, a prawy górny koniec reprezentuje bardziej oddalony atom. Na ogół preferowane są *projekcje Newmana* albo *zygzakowate*.



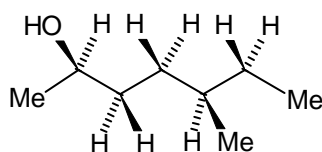
naprzemianległa



nakładająca się

Rzut zygzakowaty (*Zig-zag Projection*)

Rzut stereochemiczny acyklicznej cząsteczki (lub części molekuly), w którym łańcuch jest reprezentowany przez leżącą w płaszczyźnie zygzakowatą linią, a podstawniki są pokazane jako leżące pod lub nad płaszczyzną.



***S* (*S*)**

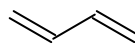
Patrz *R,S*.

***sc* (*sc*)**

Patrz *kąt torsyjny*.

***s-cis, s-trans* (*s-cis, s-trans*)**

Rozmieszczenie w przestrzeni dwóch sprzężonych wiązań podwójnych wokół łączącego je wiązania pojedynczego określane jest jako *s-cis* jeśli jest *syn-periplanarne* i *s-trans* jeżeli jest *antiperiplanarne*. Nie należy używać tych terminów w odniesieniu do innych układów, jak np. *N*-alkiloamidy, w przypadku których należy stosować system *E/Z* lub *sp/ap*.

*s-cis**s-trans***Sens Chiralności (*Chirality Sense*)**

Właściwość odróżniająca enancjomorfy. Określenia dwóch form enancjomerycznych dokonuje się przez odniesienie do zorientowanej przestrzeni, np. śruby nagwintowanej w prawo albo nagwintowanej w lewo. Wyrażenie „przeciwna chiralność” jest skrótem „przeciwny sens chiralności”.

***Si* (*Si*)**

Patrz *Re, Si*.

Sila skręcalności (*Rotatory Power*)

Ilościowa miara *czynności optycznej*.

Skręcalność optyczna (*Optical Rotation*)

Patrz *czynność optyczna*.

sp (*sp*)

Patrz kąt torsyjny.

Spontaniczne rozszczepienie (*Spontaneous Resolution*)

Patrz *racemiczny konglomerat*.

SR (*SR*)

Patrz *racemat*.

Stereodeskryptor (*Stereodescriptor*)

Przedrostek określający *konfigurację* (absolutną lub względną) albo *konformację*.

Na przykład *R,S*; *r,s*; *P,M*; *Re,Si*; *E,Z*; *ap,sp* itd.

Stereoelektronowy (*Stereoelectronic*)

Dotyczy zależności właściwości (zwłaszcza energii) indywiduum molekularnego w określonym stanie elektronowym (lub stanie przejściowym) od względnej geometrii jąder. Zwykle bierze się pod uwagę elektronowy stan podstawowy, ale termin może być stosowany również do stanów wzbudzonych. Efekty stereoelektronowe powstają w wyniku różnego ułożenia orbitali elektronowych w zależności od geometrii jąder [3].

Stereoheterotopowy (*Stereoheterotopic*)

Albo *enancjotopowy* albo *diastereotopowy*; w odróżnieniu od terminu konstytucyjnie heterotopowy, który był używany do opisu identycznych grup umiejscowionych w konstytucyjnie nierównocennych pozycjach. Patrz także *pro-R*, *pro-S*.

Stereoizomeria (*Stereoisomerism*)

Izomeria wynikająca z różnic w przestrzennym rozmieszczeniu atomów bez różnic pomiędzy izomerami w połączeniach lub rzędowości wiązań.

Stereoizomeria, planarna (*Stereoisomerism, Planar*)

Patrz *chiralność płaszczyznowa*.

Stereoizomery (*Stereoisomers*)

Izomery, które mają taką samą konstytucję, ale różnią się rozmieszczeniem atomów w przestrzeni. Patrz *enancjomer, diastereoizomer, izomery cis-trans*.

Stereoizomery torsyjne (*Torsional Stereoisomers*)

Stereoizomery, które ulegają interkonwersji (rzeczywistej lub teoretycznej) w wyniku skręcania wokół osi wiązania. Zalicza się do nich *E,Z*-izomery alkenów, *atropoizomery* i *rotamery*.

Stereokonwergencja (*Stereoconvergence*)

Powstawanie w przewadze tego samego *stereoizomeru* (lub mieszaniny stereoizomerów) produktu reakcji gdy dwa różne stereoizomery reagenta są użyte w takiej samej reakcji. Gdy produktem jest jeden enancjomer proces nazywany jest enancjokonwergencją.

Stereomutacja (*Stereomutation*)

Zmiana *konfiguracji* w *jednostce stereogenicznej* spowodowana oddziaływaniem fizycznym lub chemicznym. Patrz *epimeryzacja*.

Stereoselektywność (*Stereoselectivity*)

Preferencyjne powstawanie w reakcji chemicznej jednego ze stereoizomerów. Gdy stereoizomery są enancjomerami, zjawisko nazywane jest enancjoselektywnością i jego ilościową miarą jest *nadmiar enancjomeru*; gdy są one diastereoizomerami nazywa się diasteroelektywnością i jego ilościową miarą jest *nadmiar diastereoizomeru*.

Stereospecyficzność (*Stereospecificity*)

Reakcję nazywa się stereospecyficzną, jeżeli substraty różniące się tylko konfiguracją są przetwarzane w stereoizomeryczne produkty. W myśl tej definicji

proces stereospecyficzny musi być stereoselektywny, ale nie wszystkie procesy stereoselektywne są stereospecyficzne [3].

Stosunek diastereomeryczny (*Diastereomeric ratio*)

Ten termin jest definiowany analogicznie do *stosunku enancjomerycznego* jako stosunek udziału procentowego w mieszaninie jednego z diastereomerów do drugiego.

Stosunek enancjomeryczny (*Enantiomeric ratio*)

Stosunek procentowej zawartości w mieszaninie jednego enancjomeru do drugiego, np. 70(+) : 30(-).

Struktura czwartorzędowa (*Quaternary Structure*)

Określone uporządkowanie dwóch lub więcej makromolekuł mających trzeciorzędową strukturę taką jak białka, które są utrzymywane razem wiązaniami wodorowymi, siłami van der Waalsa i kulombowskimi. Patrz także *struktura pierwszorzędowa*, *struktura drugorzędowa*, *struktura trzeciorzędowa*.

Struktura drugorzędowa (*Secondary Structure*)

Konformacyjne rozmieszczenie (α -helisa, β -pofałdowana kartka itd.) fragmentów szkieletu makromolekuły takiej jak łańcuch polipeptydu lub białka, z pominięciem konformacji bocznych łańcuchów albo wzajemnej relacji poszczególnych segmentów. Patrz także *struktura pierwszorzędowa*, *struktura trzeciorzędowa*, *struktura czwartorzędowa*.

Struktura pierwszorzędowa (*Primary Structure*)

W odniesieniu do makromolekuł takich jak białka, wzór konstytucyjny, zwykle

skrócony do stwierdzenia kolejności aminokwasów i, jeśli to ma miejsce, usieciowania łańcuchów. Patrz również *struktura drugorzędowa*, *struktura trzeciorzędowa*, *struktura czwartorzędowa*.

Struktura trzeciorzędowa (*Tertiary Structure*)

Przestrzenne uporządkowanie (włącznie z konformacją) całej molekuly białka lub innej makromolekuly składającej się z jednego łańcucha. Patrz także *struktura pierwszorzędowa*, *struktura drugorzędowa*, *struktura czwartorzędowa*.

Swobodna rotacja, zahamowana rotacja, ograniczona rotacja (*Free Rotation, Hindered Rotation, Restricted Rotation*)

W odniesieniu do stereochemii rotację wokół wiązania określa się jako „swobodną” kiedy *bariera rotacji* jest tak niska, że różne konformacje nie mogą być dostrzeżone jako różne rodzaje chemiczne w skali czasu eksperymentu.

Zahamowanie rotacji grup wokół wiązania w następstwie występowania dostatecznie dużej *bariery rotacji* umożliwiające obserwowanie zjawiska w skali czasu eksperymentu jest nazywane zahamowaną rotacją lub ograniczoną rotacją.

Syn

1. Patrz *kąt torsyjny*.
2. Patrz *endo*, *egzo*, *syn*, *anti*.
3. Patrz stosowanie terminu do opisu reakcji suprafacjalnej addycji lub eliminacji [3].
4. Poprzednio używany do opisu stereochemii oksymów i zbliżonych układów (patrz *E,Z*).

Synklinalny (*Synclinal*)

Patrz *kąt torsyjny*.

Synperiplanarny (*Synperiplanar*)

Patrz *kąt torsyjny*.

Synteza asymetryczna (*Asymmetric Synthesis*)

Tradycyjne określenie *syntezy stereoselektywnej* prowadzącej do chiralnych związków.

Synteza stereoselektywna (*Stereoselective Synthesis*)

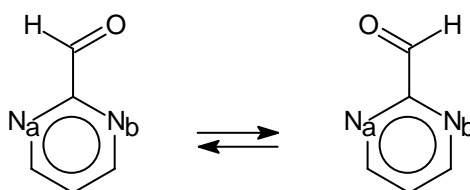
Reakcja chemiczna (lub sekwencja reakcji), w której powstaje jeden lub więcej nowych elementów chiralności w cząsteczce substratu, i która prowadzi do otrzymania stereoizomerycznych (enancjomerycznych lub diastereoizomerycznych) produktów w nierównych ilościach. Tradycyjnie nazywana *syntezą asymetryczną*. Patrz także *stereoselektywność*.

System C.I.P. (*C.I.P. System*)

Skrót : System Cahn'a-Ingolda-Preloga (patrz *pierwszeństwo C.I.P.*)

Topomeryzacja (*Topomerisation*)

Reakcja identyczności prowadząca do wymiany pozycji takich samych ligandów. Biorące w niej udział nierozróżnialne indywidua molekularne nazywane są topomerami. Na przykład w poniższej reakcji dwa identyczne atomy N_a i N_b wymieniają miejsca w wyniku obrotu wokół wiązania C-aryl, ale mogą być zidentyfikowane w widmach magnetycznego rezonansu jądrowego. Jest to przypadek zdegenerowanej izomeryzacji [3].

**Topomery** (*Topomers*)

Patrz *topomeryzacja*.

trans (*trans*)

Patrz *cis,trans*.

Transformacja asymetryczna (*Asymmetric Transformation*)

Proces przemiany racematu w czysty *enancjomer* albo mieszaninę, w której jeden z enancjomerów występuje w nadmiarze, lub mieszaniny *diastereoizomerów* w jeden diastereoizomer bądź mieszaninę, w której jeden z diastereoizomerów przeważa. Taką przemianę nazywa się czasami deracemizacją.

Jeśli dwa enancjomery *chiralnego* substratu A łatwo ulegają interkonwersji i jeśli do roztworu racemicznego A dodać równą ilość lub nadmiar innego, nieracemizującego, enancjomerycznie czystego rodzaju chemicznego, np. (*R*)-B, to powstająca mieszanina adduktów A•B na ogół zawiera nierówne ilości diastereoizomerów (*R*)-A•(*R*)-B i (*S*)-A•(*R*)-B. Rezultat takiego równowagowania nazywany jest transformacją asymetryczną pierwszego rodzaju. Jeśli w takim układzie dwa diastereoizomeryczne addukty znacznie różnią się rozpuszczalnością tak, że tylko jeden z nich, powiedzmy (*R*)-A•(*R*)-B, krystalizuje z roztworu wówczas równowagowanie diastereoizomerów z równoczesną krystalizacją doprowadzi do całkowitego (albo prawie całkowitego) wydzielenia substratu A w postaci krystalicznego diastereoizomeru (*R*)-A•(*R*)-B. Taka wywołana krystalizacją transformacja asymetryczna nazywana jest transformacją asymetryczną drugiego rodzaju. Patrz także *stereokonwergencja*.

treo (*threo*)

Patrz *erythro*.

u (*u*)

Patrz *l,u*.

Wewnętrzna kompensacja (*Internal Compensation*)

Patrz związek *mezo*.

Używanie terminu zdecydowanie niewskazane.

Wydajność optyczna (*Optical Yield*)

W reakcji chemicznej, w której uczestniczą chiralne reagenty (substraty, katalizatory) i produkty, stosunek *czystości optycznej* produktu do czystości

optycznej substratu, reagenta albo katalizatora. Nie należy mylić tego pojęcia z *nadmiarem enancjomerycznym*.

Wzór perspektywiczny (*Perspective Formula*)

Geometryczne przedstawienie cech stereochemicznych molekuly albo modelu, który wygląda jak widziany z określonego kierunku. Patrz *projekcja Fischera*, *projekcja Newmana*, *wzór rzutowy*, *rzut konikowy*, *rzut klinowy*, *rzut zygzakowaty*. Patrz także *wzór stereochemiczny*.

Wzór przestrzenny (*Space Formula*)

Synonim wzoru stereochemicznego.

Wzór rzutowy (*Projection Formula*)

Dwuwymiarowa reprezentacja trójwymiarowej struktury molekularnej uzyskana przez rzutowanie wiązań (przedstawianych jako linie) na płaszczyznę z lub bez zaznaczenia położenia odpowiednich atomów ich symbolami chemicznymi.

Wzór rzutowy reprezentujący przestrzenne rozmieszczenie wiązań nazywa się *wzorem stereochemicznym*. Przykładami wzorów stereochemicznych są *projekcja Fischera*, *projekcja Newmana*, *rzut konikowy*, *rzut klinowy*, *rzut zygzakowaty*. Patrz także *wzór perspektywiczny*.

Wzór stereochemiczny (*Stereochemical Formula/Stereoformula*)

Trójwymiarowy widok cząsteczki jako takiej albo jej rzutu. Patrz *wzór rzutowy*.

Z (Z)

Patrz *E,Z*.

Zahamowana rotacja (*Hindered Rotation*)

Patrz *swobodna rotacja, ograniczona rotacja*.

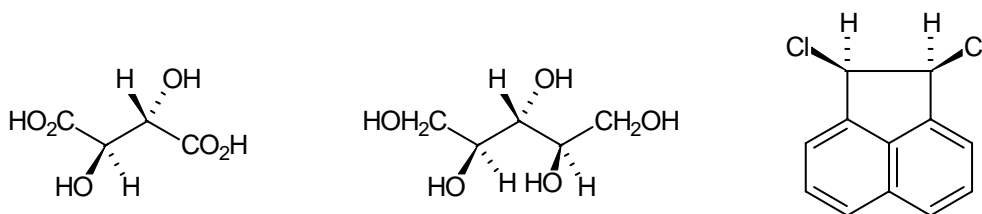
Zewnętrzna kompensacja (*External Compensation*)

Brak *czynności optycznej racematu*.

Używanie tego terminu jest zdecydowanie nie zalecane.

Związek *mezo* (*meso-Compound*)

Termin oznaczający achiralny(e) element(y) zbioru *diastereoizomerów* obejmującego także jeden lub więcej chiralnych związków. Np.:



Związek *quasi-racemiczny* (*Quasi-racemic Compound*)

Krystaliczny produkt asocjacji 1:1 pomiędzy *quasi-enancjomerami*.

Związek *racemiczny* (*Racemic Compound*)

Krystaliczny *racemat*, w którym dwa *enancjomery* występują w równych ilościach w ściśle określonym porządku w sieci homogenicznego krystalicznego związku addycyjnego.

Literatura

1. Nomenklatura Związków Organicznych. Część E. Stereochemia, PWN, 1979.
2. a) Nomenklatura związków organicznych, Części A, B, C, D i E, PTCh, 1992.

- b) Przewodnik do Nomenklatury Związków Organicznych, PTCh, 1994.
3. a) Glosariusz terminów stosowanych w fizycznej chemii organicznej, PWN, 1983;
b) Glossary of Terms Used in Physical Organic Chemistry, *Pure Appl. Chem.*, **66**, 1077-1184 (1994).
 4. a) Nomenklatura Związków Nieorganicznych, Ossolineum, 1988.
 5. Kompendium Nomenklatury Makromolekularnej, PTCh, 1995.
Compendium of Macromolecular Nomenclature, Blackwell, 1991,
 6. Biochemical Nomenclature and Related Documents, 2nd edition, 1992, Portland Press, pp. 1-18.
 7. IUPAC, Compendium of Analytical Nomenclature, 2nd edition, Blackwell, 1987; IUPAC, Compendium of Chemical Terminology, Blackwell, 1987.
 8. K. L. Loening, w *Chemical Structures*, W. A. Warr (Ed.), 1988, Springer Verlag, 412-423.
 9. Nowe Polskie Słownictwo Biochemiczne, PWN, 1983, str. 145-184.
Tentative Rules for Carbohydrate Nomenclature, Part 1, *Eur. J. Biochem.*, **21**, 455-477 (1971).
 10. Nomenklatura Steroidów, *Wiad. Chem.*, Biblioteka, 1994.
Nomenclature of Steroids, *Pure Appl. Chem.*, **61**, 1783-1822 (1989).
 11. Nomenclature of Tetrapyrroles, *Pure Appl. Chem.*, **59**, 779-832 (1987).
 12. Nomenklatura Steroidów, *Wiad. Chem.*, Biblioteka, 1994.
Nomenclature of Steroids, *Pure Appl. Chem.*, **61**, 1783-1822 (1989).
 13. Nomenclature of Tetrapyrroles, *Pure Appl. Chem.*, **59**, 779-832 (1987).
 14. K. Mislow, J. Siegel, *J. Am. Chem. Soc.*, **106**, 3319-3328 (1984).
 15. E. A. Halevi, *J. Chem. Res. (S)* 206-207 (1985).
 16. G. Helmchen, *Enantiomer*, **2**, 315-318 (1997)
 19. "Stereochemical Definitions and Notations Relating to Polymers, *Pure Appl. Chem.*, **51**, 733-752 (1981).
 18. R. S. Cahn, C. K. Ingold, V. Prelog, *Angew. Chem. Intern. Ed. Eng.* **5**, 385-415, 511 (1966)
 19. V. Prelog, G. Helmchen, *Angew. Chem. Intern. Ed. Eng.* **21**, 567-583 (1982).
 20. E. L. Muetteries, *J. Am. Chem. Soc.*, **91**, 1636-1643 (1969).
 21. J. Dale, *Acta Chem. Scand.*, **27**, 1115-1129 (1973).